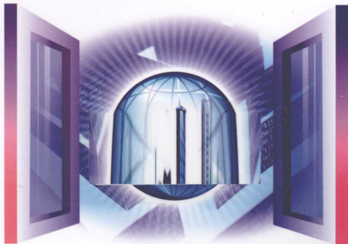

北京理工大学211工程
研 究 生 规 划 教 材

科学与工程计算方法

Computational Methods in Science & Engineering

◎ 熊春光 李育安 主编




北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

数
学

责任编辑：张慧峰
装帧设计：原创在线

本书介绍了科学与工程计算中最常用和最基本的数值计算方法。

本书内容充实，重点突出，强调方法的构造与应用；推导过程既重视理论分析，又避免过多的理论证明；对每种方法都在计算机上编程实现，并给出真解、数值解和误差的曲面图，让读者有直观的感受。全书共8章，分别是：偏微分方程的一般概念，抛物方程的差分格式，双曲方程的差分格式，对流扩散方程的差分格式，椭圆方程差分格式，数学物理方程的变分原理，有限元方法，统计计算。

本书适合非数学专业的工科研究生或者计算数学专业高年级本科生学习使用。

定价：37.00元



北京理工大学211工程
研究生规划教材

科学与工程计算方法

数学

Computational
Methods in Science & Engineering

◎ 熊春光 李育安 主编

北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目（CIP）数据

科学与工程计算方法／熊春光，李育安主编．—北京：北京理工大学出版社，2011.4

ISBN 978－7－5640－4357－5

Ⅰ.①科…　Ⅱ.①熊…　②李…　Ⅲ.①数值计算－计算方法－研究生－教材　Ⅳ.①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2011）第 043594 号

出版发行／北京理工大学出版社
社　　址／北京市海淀区中关村南大街 5 号
邮　　编／100081
电　　话／（010）68914775（办公室）　68944990（批销中心）　68911084（读者服务部）
网　　址／http://www.bitpress.com.cn
经　　销／全国各地新华书店
印　　刷／北京国马印刷厂
开　　本／787 毫米×960 毫米　1/16
印　　张／15.5
字　　数／312 千字
版　　次／2011 年 4 月第 1 版　　2011 年 4 月第 1 次印刷
印　　数／1～2000 册
定　　价／37.00 元

责任校对／王　丹
责任印制／边心超

前　　言

在科学技术的发展进程中，理论研究和实验一直都是重要的手段和方法. 但是随着研究的深入以及由于对象本身的复杂性，或者实验费用的高昂，很多研究已经无法通过理论来描述，或者用实验方法来实现. 然而随着计算机技术的高速发展，利用高性能的计算机作为工具，能够帮助我们研究许多以前复杂的无法求解的问题或者无法描述的自然现象，去模拟或者仿真那些复杂的系统，得到在实际当中所需要的一些数据. 于是科学计算理所当然地成为当前科学研究中重要的手段.

现代科学、技术、工程中的大量数学模型都可以用微分方程来描述，很多近代自然科学的基本方程本身就是微分方程. 绝大多数微分方程（特别是偏微分方程）定解问题的解很难以实用的解析形式来表示. 在科学的计算机化进程中，科学与工程计算作为一门工具性、方法性、边缘交叉性的新学科开始了自己的新发展，微分方程数值解法也得到了前所未有的发展和应用. 由于科学基本规律大多是通过微分方程来描述的，科学与工程计算的主要任务就是求解形形色色的微分方程定解问题. 因此，今天需要掌握和应用微分方程数值解法已不再限于数学系的学生，大量从事力学、物理学、天文学、电子、电机、地质、石油勘探的科技工作者也需要大量这方面的知识. 比如，在核反应的过程中，巨大的能量在瞬间释放出来，反应过程中的各个物理量是无法通过仪器检测出来的. 在物理理论中，核反应过程的数学模型是非线性的微分方程组，于是可以通过在计算机上对核反应过程进行数值模拟或仿真，可以减少实验的次数以及实验的费用. 还有汽车的设计和飞机的设计，需要大量的风洞试验，也可以在计算机上进行模拟实验，减少实验次数、节约费用. 还有无法进行实验的情况，比如大坝的设计、天气预报，等等.

另外，由于计算机的普及，利用计算机进行工程与科学计算已成为理工科学生必备的技能. “科学计算方法”介绍科学计算中最常用和最基本的数值方法，较全面地了解各类数值计算问题的算法，在满足教学大纲要求的基础上又有提高的空间. 为此，本书力求在内容上取材适中，突出重点，强调方法的构造与应用；在讲解方式上论述思路清晰，推导过程简捷，既重视理论分析，又避免过多的理论证明；对每种方法都在计算机上编程实现，并给出真解、数值解和误差的曲面图，让读者有更加直观的感受.

本书基于作者最近几年在北京理工大学的工科研究生教学经验上以及工科的实际需求编写的，是工科研究生的入门教材，其中第 1 ～ 7 章由熊春光编写，第 8 章由李育安编写. 此书不是包罗万象的所有数值方法的堆积，不求面面俱到，而是注重基本思想. 为工科研究生在今后科研工作中解决实际工程问题奠定良好的基础.

基于工科研究生所学课程的特点，第 1 章是一些预备知识，主要介绍一些基本概念，以及

各种社会现象和自然现象是如何通过偏微分方程进行描述的. 另外还介绍偏微分方程与差分的一些基本概念以及差分方法所需要的基本的必备知识. 第 2 ～ 5 章是求解不同类型偏微分方程的差分方法. 第 6 章、第 7 章是介绍有限元方法. 第 8 章，简单介绍如何使用统计软件 *SPSS* 进行计算. 对于数值解部分，我们通过一些典型、常用、有效的数值算法来讲述如何构造各种数值算法以及基本思想. 给予实际例子让读者了解如何在计算机上应用各种数值算法求解偏微分方程的定解问题，并编写程序实现各种数值算法. 根据工科研究生学习的特点和数学基础，我们对数值算法中的一些基本概念和基本理论(如算法的稳定性、收敛性、误差估计以及部分泛函的知识)尽可能给出直观、简洁、通俗的描述，而不是逻辑严谨和理论完备的阐述. 尽管只是对基本理论采取点到即止的原则，但这些理论不可完全忽略不讲，因为这些理论对使用这些数值算法具有指导性意义. 统计计算部分把统计最基本和最有用的部分：相关分析、回归分析、方差分析、主成分分析、因子分析、聚类分析、判别分析、典型相关分析等常用统计方法的基本原理介绍给读者，以及在操作简便、界面友好、应用普及的统计软件 *SPSS* 中的实例操作.

只要学过微积分、线性代数和概率统计，并对数值分析和数值代数有初步了解的读者都能读懂本教材的所有内容. 本教材的讲授时间是按照 54 学时左右编写的. 全书共三部分，第一部分是第 1 ～ 5 章，是差分方法的内容. 第二部分是第 6 章和第 7 章，讲述有限元方法. 前面两部分由熊春光执笔. 第三部分即第 8 章，讲述统计计算. 此部分由李育安执笔. 三部分内容上是相互独立的. 读者可以根据实际情况灵活地选择自己的内容进行学习. 为了提高学生实际解决问题的能力，主要章节的后面都匹配一定数量的理论学习的练习和实际操作的上机编写程序的练习. 上机编写程序的练习是为了增强对算法的感性认识. 尽管如此，我们的习题设计还有很多不完善的地方，在今后需要改进. 另外，由于时间关系，此教材没有完全反映北京理工大学课堂的教学内容，此教材的内容是我们课堂的主体部分，还有部分内容并没有选入教材中，因为我们根据每年学生的实际情况，教学的部分内容进行调整，比如，更深层次常微分方程的数值解法(刚性问题的数值解法)、计算流体力学简介和计算电磁学简介，等等.

鉴于我的学识和编写水平，虽经很大努力，仍然有许多不妥之处. 希望读者在使用本教材时能反馈你们的宝贵意见，不胜感激. 感谢部分学生写了部分程序，以及李志荣调试了大部分程序. 另外也感谢北京理工大学出版社的编辑为此教材的出版付出的辛勤努力.

目　　录

第 1 章　偏微分方程的一般概念

1.1　偏微分方程的定义

在高等数学中，我们学习了常微分方程；在数值分析中，我们研究了常微分方程的近似解的情况. 然而，在很多重要的物理、力学、电气和无线电技术等各类工程中，涉及的基本方程均是偏微分方程，也即多元函数的微分方程.

如果未知函数 $z = f(x,y)$ 是二元函数，则在一般情况下将带有一阶偏导数的微分方程

$$F(x,y,z,\frac{\partial z}{\partial x},\frac{\partial z}{\partial y}) = 0$$

称为一阶偏微分方程. 如果是

$$F(x,y,z,\frac{\partial z}{\partial x},\frac{\partial z}{\partial y},\frac{\partial^2 z}{\partial x^2},\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y},\frac{\partial^2 z}{\partial y^2}) = 0,$$

则称为二阶偏微分方程. 类似地，可以定义 n 阶偏微分方程.

此外，还可以给出线性（齐次或者非齐次）偏微分方程、非线性（齐次或者非齐次）偏微分方程的定义，在此就不一一说明了.

1.2　典型方程的导出

1. 弦的振动方程

考虑一根拉紧的柔软且有弹性的弦的微小横振动，弦上各点的位移与弦的平衡位置垂直. 设弦长为 l，两端固定在 x 轴的 O 点和 l 点，求弦在平衡位置附近做微小振动时的表达式.

设 $u(x,t)$ 表示弦上的点 x 在 t 时刻的位移，$T(x,t)$ 表示弦上的点 x 在 t 时刻的张力大小，弦的线密度为 ρ. 由于假设弦是柔软的，不抵抗弯曲，则其方向是切线方向.

考虑在任一时刻 t，在 x 轴任取一段$[x,x+\Delta x]$. 如图 1.1 所示.

我们来研究此时相对应弦的状态. 由高等数学的知识，此段的弧长为

$$\Delta s = \int_x^{x+\Delta x} \sqrt{1+(\frac{\partial u}{\partial x})^2}\,\mathrm{d}x.$$

假设弦的振动很小，即每点的位移 $u(x,t)$ 很小，$\frac{\partial u}{\partial x}$ 也很小，于是可以忽略高阶无穷小项，

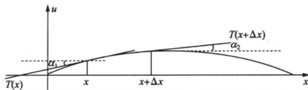


图 1.1

$$s = \int_x^{x+\Delta x} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2}\, \mathrm{d}x \approx \Delta x.$$

上式表明，在振动的过程中，弧的长度与时间无关，即在振动过程中弦的长度看成是不变的.由此可以得到，各点的张力的大小与时间无关.

因为质点只在垂直方向运动，在 x 轴方向保持平衡，由牛顿第二定律有：

$$T(x+\Delta x)\cos\alpha_2 = T(x)\cos\alpha_1, \tag{1}$$

$$\rho\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T(x+\Delta x)\sin\alpha_2 - T(x)\sin\alpha_1 + \int_x^{x+\Delta x} F(x,t)\mathrm{d}x, \tag{2}$$

其中 α_1 和 α_2 分别是在点 x 和 $x+\Delta x$ 处的切线与 x 轴的夹角，$F(x,t)$ 是外力的线密度.

因为振动是微小的，故张力方向与 x 轴的夹角很小，即 $\alpha_i \approx 0$. 所以

$$\cos\alpha_1 \approx 1,\ \sin\alpha_1 \approx \tan\alpha_1 = \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{(x,t)}.$$

同理有 $\sin\alpha_2 \approx \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{(x+\Delta x,t)}$.

由此可以得到 $T(x) = T(x+\Delta x)$，即弦的张力的大小与质点的位置无关，即张力为常数，记为 T. 对(2) 中的积分利用积分中值定理，得到

$$\rho\Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T\left(\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{(x+\Delta x,t)} - \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{(x,t)}\right) + F(\xi,t)\Delta x, \quad \xi \in (x, x+\Delta x)$$

对上式两边同时除以 Δx，当 $\Delta x \to 0$ 时，有

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = T\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(x,t),$$

令 $\frac{T}{\rho} = a^2, f(x,t) = \frac{1}{\rho}F(x,t)$，则上式写为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t). \tag{3}$$

于是，方程(3) 为所求的弦振动方程.

如果研究的对象是薄膜微小振动，则得到二维波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) + f(x,t).$$

2. 热传导方程

在工程技术中，经常研究物体的散热状况和温度分布. 因为温度分布不均，热量会传播，于是产生热传导现象.

考虑某空间物体 G 的热传导问题. 假设物体均匀、各向同性，内部有热源，并且与周围介质存在热交换. 设 $u(x,y,z,t)$ 表示物体上的点 (x,y,z) 在 t 时刻的温度.

在研究热传导问题之前，先给出热传导 Fourier 定律.

在时间 $\mathrm{d}t$ 内，流过物体表面一小面积 $\mathrm{d}s$ 的热量 $\mathrm{d}Q$ 与物体的温度沿曲面 $\mathrm{d}s$ 的法线方向的方向导数 $\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}$ 成正比，即

$$\mathrm{d}Q = -k(x,y,z)\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s\mathrm{d}t.$$

其中 $k(x,y,z)$ 是物体在点 (x,y,z) 处的热传导系数，取正值. 规定 $\boldsymbol{n}$ 所指的那一侧为曲面的正侧. $\mathrm{d}Q$ 表示从负侧流向正侧的热量，即用"—"来表示热流量方向与温度梯度的正方向相反. 在物体内部任取一闭曲面 Γ，它所包围的区域记为 Ω，从 t_1 时刻到 t_2 时刻经过曲面 $\mathrm{d}s$ 的热量为

$$Q_1 = -\int_{t_1}^{t_2}\oiint_{\Gamma} k(x,y,z)\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s\mathrm{d}t,$$

对上式由 Guass 公式有

$$-\int_{t_1}^{t_2}\oiint_{\Gamma} k(x,y,z)\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s\mathrm{d}t \underline{\underline{\text{Guass 公式}}} \int_{t_1}^{t_2}\int_{\Omega}\nabla\cdot(k\nabla u)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t.$$

设物体内部有热源，其热源密度为 $F(x,y,z,t)>0$，则在时间 $[t_1,t_2]$ 内物体所产生的热量为

$$Q_2 = \int_{t_1}^{t_2}\int_{\Omega}F(x,y,z,t)\mathrm{d}v\mathrm{d}t.$$

如果 $F(x,y,z,t)<0$，则表示热源吸收的热量.

从 t_1 时刻到 t_2 时刻，物体根据温度变化所需要的热量

$$Q_3 = \int_{\Omega}c\rho[u(x,y,z,t_1)-u(x,y,z,t_1)]\mathrm{d}v\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2}\int_{\Omega}c\rho\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}t\mathrm{d}v,$$

其中 $c(x,y,z)$ 为物体的比热，$\rho(x,y,z)$ 为物体的密度，$\mathrm{d}v$ 表示物体的体积元.

根据热量守恒定理有

$$Q_1 + Q_2 = Q_3,$$

$$\int_{t_1}^{t_2}\int_{\Omega}\Big(\nabla\cdot(k\nabla u)+F\Big)\mathrm{d}v\mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2}\int_{\Omega}c\rho\frac{\partial u}{\partial t}\mathrm{d}t\mathrm{d}v.$$

由于 Ω,t_1,t_2 是任意的，于是对物体内任意一点有

$$\nabla\cdot(k\nabla u)+F(x,y,z,t) = c\rho\frac{\partial u}{\partial t},\quad x\in G$$

如果 k 为常数，令 $a^2 = \frac{K}{c\rho}, f = \frac{F}{c\rho}$，则有

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u + f, \quad x \in G$$

这是三维热传导方程.

3. 理想流体的力学问题

考虑理想流体，即没有粘性，每个面上的应力都沿法线方向，与面的方向无关.

设流体的物理量，密度是 $\rho(x_1, x_2, x_3, t)$，速度是 $u(x_1, x_2, x_3, t)$，u_i 是 u 沿空间三个坐标轴方向的分量. 假设这些函数都是连续可微的，满足我们讨论中所需要的任何要求. 考虑任意时间段$[t, t+\mathrm{d}t]$，在流体内任取闭曲面 S，包围的区域为 Ω. 从时间 t 到 $t+\mathrm{d}t$ 内，通过曲面 S 上一小块曲面 $\mathrm{d}s$ 的流量 $\mathrm{d}Q_1$ 为 $\rho u_n \mathrm{d}t\mathrm{d}s$，$\boldsymbol{n}$ 表示曲面的外法线方向，u_n 表示 u 在 $\boldsymbol{n}$ 方向上的分量.

$$Q_1 = \mathrm{d}t \int_S \rho u_n \mathrm{d}s = \mathrm{d}t \int_S [\rho u_1 \cos(n, x_1) + \rho u_2 \cos(n, x_2) + \rho u_3 \cos(n, x_3)] \mathrm{d}s$$

$$\underline{\text{Guass 公式}} \int_t^{t+\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \int_\Omega \left(\frac{\partial(\rho u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3)}{\partial x_3} \right) \mathrm{d}v,$$

在 S 内从时间 t 到 $t+\mathrm{d}t$ 内，流体密度的变化所需要的流量是

$$Q_2 = \int_\Omega (\rho|_{t+\mathrm{d}t} - \rho|_t) \mathrm{d}v = \int_t^{t+\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \int_\Omega \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathrm{d}v.$$

假设流体内部不产生质量，于是由质量守恒定律有

$$Q_1 = -Q_2.$$

即有

$$\int_t^{t+\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \int_\Omega \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3)}{\partial x_3} \right) \mathrm{d}v = 0.$$

由于时间段和闭曲面的任意性，于是得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0.$$

上式称为流体的连续性方程.

另外，理想流体处于平衡状态或者运动状态时，流体之间的相互压力为法向压力. 设单位面积上的压力为 p，$\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 表示有向曲面，方向为曲面的法向 n. 对于任意时刻 t，曲面 S 上所受的压力为

$$-\int_S p \,\mathrm{d}\boldsymbol{s} = -\int_S \sum_{j=1}^{3} p \cos(n, x_j) \boldsymbol{n}_j \mathrm{d}s = -\int_\Omega \sum_{j=1}^{3} \frac{\partial p}{\partial x_j} \boldsymbol{n}_j \mathrm{d}v = -\int_\Omega \nabla p \mathrm{d}v,$$

假设在整个 $\boldsymbol{\Omega}$ 上的外力为$\int_\Omega \rho \boldsymbol{F} \mathrm{d}v$，$\boldsymbol{a}$ 为流体加速度，由牛顿第二运动定律有

$$\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{a}\,\mathrm{d}v=\int_{\Omega}\rho\boldsymbol{F}\,\mathrm{d}v-\int_{\Omega}\nabla p\,\mathrm{d}v.$$

由体积元的任意性可得

$$\rho\boldsymbol{a}-\rho\boldsymbol{F}+\nabla p=0.$$

又因为

$$a_i=\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial u_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial x_j}{\partial t}=\frac{\partial u_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}u_j,$$

由此得到

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}+\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}u_j+\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}=f_i,\qquad(i=1,2,3).$$

这就是理想流体的运动方程组.

最后考虑流体的能量. 为了讨论的简单,假设流体与外界无能量交换. 在$[t,t+\mathrm{d}t]$时间内能量的增加量等于外力和表面力做功之和. 设流体单位质量的内能是 e.

根据能量守恒定律有

$$\int_{\Omega}\rho\left(e+\frac{1}{2}\mid u\mid^2\right)\Big|_t\mathrm{d}v-\int_{\Omega}\rho\left(e+\frac{1}{2}\mid u\mid^2\right)\Big|_{t+\mathrm{d}t}\mathrm{d}v$$
$$=-\int_t^{t+\mathrm{d}t}\mathrm{d}t\oint_S pun\,\mathrm{d}s+\int_t^{t+\mathrm{d}t}\mathrm{d}t\int_{\Omega}\rho Fu\,\mathrm{d}v\mathrm{d}t,$$

类似地得到

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho\left(e+\frac{1}{2}\mid u\mid^2\right)\right]=\nabla\cdot(\rho pu)+\rho Fu.$$

此式称为能量方程.

4. 传输线方程

在电气技术、无线电技术以及电信技术中,经常要用二阶偏微分方程. 例如,考虑双线传输的电路,假设导线的电阻、导线间的电感、电导以及电容都是均匀分布的. 用R表示单位电阻,L表示单位电感,G表示单位电导,C表示单位电容. 设在t时刻通过导线上x点的电流为$I(x,t)$,电压为$u(x,t)$,其中 x 和 t 分别表示从导线的起点开始到某点的距离以及时间变量. 用微元法讨论导线上电压降与电流之间的关系. 在导线任取一小段 $\mathrm{d}x$,则得到此小段的电阻 $R\mathrm{d}x$,电感 $L\mathrm{d}x$,电导 $G\mathrm{d}x$ 以及电容 $C\mathrm{d}x$. 则在此微元的终点 $x+\mathrm{d}x$ 的电流和电压分别为 $I(x,t)+\frac{\partial I}{\partial x}\mathrm{d}x$ 和 $u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x$.

根据 Kirchhoff 第一定律,对于等效电路,流出电路上某点的电流等于流入此点的如下各电流之和,即为微元终点的电流 $I(x,t)+\frac{\partial I}{\partial x}\mathrm{d}x$、导线间的漏电流 $G\left[u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x\right]\mathrm{d}x$ 以及导

线介质中的平移电流 $C\frac{\partial}{\partial t}[u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x]\mathrm{d}x$ 之和. 因此有

$$I(x,t)=I(x,t)+\frac{\partial I}{\partial x}\mathrm{d}x+G[u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x]\mathrm{d}x+C\frac{\partial}{\partial t}[u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x]\mathrm{d}x \tag{4}$$

根据 Kirchhoff 第二定律,对微元起点的电压等于在串联电阻 $R\mathrm{d}x$ 上的电压降 $IR\mathrm{d}x$、在电感 $L\mathrm{d}x$ 上的电压降 $L\frac{\partial I}{\partial t}\mathrm{d}x$ 以及在微元终点的电压降 $u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x$ 的和,即

$$u(x,t)=IR\mathrm{d}x+L\frac{\partial I}{\partial t}\mathrm{d}x+u(x,t)+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x, \tag{5}$$

化简(4) 和(5),并忽略二阶无穷小量得到

$$0=\frac{\partial I}{\partial x}\mathrm{d}x+Gu(x,t)\mathrm{d}x+C\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}\mathrm{d}x,$$

$$0=IR\mathrm{d}x+L\frac{\partial I}{\partial t}\mathrm{d}x+\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x.$$

上面两式两端同时除以 $\mathrm{d}x$ 得到如下微分方程组

$$\begin{cases}\frac{\partial I}{\partial x}+Gu(x,t)+C\frac{\partial u(x,t)}{\partial t}=0,\\ \frac{\partial u}{\partial x}+IR+L\frac{\partial I}{\partial t}=0.\end{cases}$$

此方程组也称为电报方程.

5. 电磁学的问题

电磁场主要由电场强度 $\vec{E}$、磁场强度 $\vec{H}$、电感应强度 $\vec{D}$、磁感应强度 $\vec{B}$ 四个量来刻画,它们服从电动力学中的两个基本定律:Biot－Savart 定律和 Faraday 定律. 描述它们的数学表达式为

$$\int_l H_l\mathrm{d}l=\frac{1}{c}\int_S r_n\mathrm{d}s,\quad \int_l E_l\mathrm{d}l=-\frac{1}{c}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_S B_n\mathrm{d}s, \tag{6}$$

其中 c 为电磁波的速度,S 是以曲线 l 为边界张成的曲面. H_l 和 E_l 分别为 $\vec{H}$ 和 $\vec{E}$ 在曲线 l 上对应点的切线方向的投影,$\vec{r}=\sigma\vec{E}+\frac{\partial\vec{D}}{\partial t}$,$r_n$ 和 B_n 分别是 $\vec{r}$ 和 $\vec{B}$ 在曲面 S 上法线方向 n 的投影,σ 是电导率.

对(6) 两式的左边分别应用 Stokes 公式,得到

$$\iint_S \mathrm{rot}\vec{H}\mathrm{d}s=\frac{1}{c}\int_S(\sigma E_n+\frac{\partial D_n}{\partial t})\mathrm{d}s,\quad \iint_S \mathrm{rot}\vec{E}\mathrm{d}s=-\frac{1}{c}\int_S\frac{\partial B_n}{\partial t}\mathrm{d}s,$$

因为封闭曲线 l 的任意性,得到

$$\mathrm{c}\cdot\mathrm{rot}\vec{H}=\sigma\vec{E}_n+\frac{\partial\vec{D}_n}{\partial t},\quad \mathrm{c}\cdot\mathrm{rot}\vec{E}=-\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}.$$

又因为 $\vec{D}=\varepsilon\vec{E}$，$\vec{B}=\mu\vec{H}$，$\varepsilon,\mu$ 分别是介电常数和导磁率. 于是

$$\begin{cases} c\cdot \mathrm{rot}\vec{H}=\sigma\vec{E}_n+\varepsilon\dfrac{\partial \vec{E}n}{\partial t},\\ c\cdot \mathrm{rot}\vec{E}=-\mu\dfrac{\partial \vec{B}}{\partial t}. \end{cases}$$

6. 弹性体位移平衡方程

$$\begin{cases} (\lambda+G)\dfrac{\partial e}{\partial x}+G\Delta u+f_1=0,\\ (\lambda+G)\dfrac{\partial e}{\partial y}+G\Delta v+f_2=0,\\ (\lambda+G)\dfrac{\partial e}{\partial z}+G\Delta w+f_3=0. \end{cases}$$

其中位移为 $s=(u,v,w)$，u,v,w 是弹性体的位移分量，$e=\mathrm{div}s$ 为体积应变，f_i 为每单位体积的体积力分量，λ,G 为常数.

7. 人口发展方程

某地区的人口发展规律满足一阶线性偏微分方程

$$\frac{\partial p}{\partial r}+\frac{\partial p}{\partial t}=-pq,$$

其中 $p(r,t)$ 是关于年龄 r 和时间 t 的人口密度函数，$q(r,t)$ 是关于年龄 r 和时间 t 的人口的死亡率函数.

8. 交通流问题

考虑在笔直高速公路上行驶车辆的流动问题，它的数学模型是

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}+\dfrac{\partial q(u)}{\partial t}=0,\\ u(x,0)=u_0(x). \end{cases}$$

其中 $u(x,t)$ 表示在 t 时刻在公路 x 处的车辆分布密度，$q(x,t)$ 为 t 时刻车辆通过 x 处的流通密度，由统计资料可知，它依赖于车辆的分布密度，即 $q(u)=-\dfrac{v_f}{v_j}u(u-u_j)$，其中 v_f,v_j 分别为交通不堵塞和堵塞时的车辆速度，u_j 为交通堵塞时的车辆分布密度.

上面的内容讨论了许多种物理现象或者自然界其他现象的数学模型，最后都通过偏微分方程(组)来体现. 但是需要指出的是，这些偏微分方程(组)所反映的物理过程不只单一的反映一个特定的物理过程，例如，热传导方程还可以用来反映下面的一些物理过程：

(1) 海底电缆的电压

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\quad a=RC,$$

其中 R 和 C 分别是导线的单位电阻和单位电容.

(2) 导线圈所围的圆柱体内的磁场强度 H 满足

$$\frac{\partial H}{\partial t}=a^2\frac{\partial^2 H}{\partial x^2},$$

其中 $a^2=\frac{c^2}{4\pi\mu\sigma}$,$c$ 是光速,μ 是单位磁导,σ 是单位电导.

(3) 分子在液体中的扩散现象或者污染物在湖泊中的扩散或者在土壤中的渗透等等,溶质的浓度满足

$$\frac{\partial c}{\partial t}=D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2},$$

其中 D 是扩散系数.

弦振动方程也可以反映声学中空气的密度、声压、速度都满足波动方程,即

$$\frac{\partial^2\rho}{\partial t^2}=a^2(\frac{\partial^2\rho}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\rho}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\rho}{\partial z^2}),$$

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2}=a^2(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 p}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 p}{\partial z^2}),$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=a^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}).$$

这就是声学方程.

同样位势方程也可以用来描述不可压缩流体无旋流动、静电场的场强、定常磁场等物理过程.

1.3 定解问题及其适定性

在前面章节的讨论中,由物理现象得到数学模型,然后推导出各种方程. 这些方程反过来也描述了相应物理过程的一般规律. 例如,热传导方程是热学定律的数学形式,只要热传导服从 Fourier 定律,温度函数就是热传导方程的解. 然而我们所观察到的物理现象是具体的状态,由此所得到的微分方程不能唯一的确定一个物理过程的具体状态. 例如,弹性体、流体和电磁现象都是由波动方程进行描述的. 即使在同一个物理现象中,不同的问题又有各自的特殊性,例如,对同一根弦,当我们用不同材质的东西去拨弄时,发出的声音是不同的. 有的声音极其刺耳,而有的却是和谐悦耳的. 这是因为初始时刻振动的情况不一样,后面的振动情况也不一样. 因此,为了唯一描述一个物理过程,就不能只依赖微分方程,还需要一些条件,比如物体所处初始状态或者边界的状态. 在数学上,把这些状态称为定解条件. 适当的定解条件和微分方程一

起构成定解问题.

1. 弦振动的定解条件

(1) 初始条件

已知在弦上各点的初始速度和位移. 即

$$u(x,0)=\varphi(x),\quad \frac{\partial u(x,0)}{\partial t}=\varphi(x).$$

(2) 边界条件

① 已知弦两端点的位移变化.

$$u(0,t)=g_1(t),\quad u(L,t)=g_2(t),$$

当两端固定时， $u(0,t)=u(L,t)=0$.

② 已知弦的端点所受的垂直于弦线外力的作用,即

$$k\frac{\partial u}{\partial x}(0,t)=g_1(t),\quad k\frac{\partial u}{\partial x}(L,t)=g_2(t),$$

当两端不受外力作用时,则　$g_1(t)=g_2(t)=0$.

③ 已知端点的位移与所受垂直于弦线外力的作用,即

$$-k\frac{\partial u}{\partial x}(0,t)+\alpha u(0,t)=g_1(t),$$

$$-k\frac{\partial u}{\partial x}(L,t)+\beta u(0,t)=g_2(t).$$

当 $g_1(t)=g_2(t)=0$ 时,表示弦的端点固定在弹性支承上,α 和 β 是支承的弹性系数.

注:① 可以类似给出关于弦振动半无界问题的方程. ② 此方程不仅表示横向振动,也可以表示纵向振动,比如杆在外力作用下沿杆长方向做微小振动.

2. 热传导问题的定解条件

(1) 初始条件

已知在开始时刻物体的温度的分布情况,即　$u|_{t=0}=\varphi(x,y,z)$,$\varphi(x,y,z)$ 表示物体在点 $M(x,y,z)$ 的温度值.

(2) 边界条件

① 已知边界上的温度分布状况，　$u|_{\Gamma}=\mu(x,y、z)$,当 μ 是常数时,表示物体表面是恒温.

② 已知通过边界的热量,即　$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma}=\mu(x,y,z,t)$.

其中 $\mu>0$ 表示有热量流入,$\mu<0$ 表示有热量流出,$\mu=0$ 表示绝热.

③ 已知物体通过边界与外界进行热交换,即

$$\frac{\partial u}{\partial n}\Big|_{\Gamma}+\alpha u=\mu(x,y,z,t),$$

其中 μ 表示外界介质的温度,α 表示热交换系数.

称初值问题为 Cauchy 问题. 上述边界问题中,第一种情况称为第一类边界问题或者 Dirichlet 问题. 第二种情况称为第二边界问题或者 Neumann 问题. 第三种情况称为第三边界问题或者 Rokin 问题. 如果微分方程配以初始条件,则构成初值问题. 如果配以边界条件,则称为边界问题. 如果配以初值条件和边界条件,则称为混合问题.

在数学上,如果一个定解问题的解存在,而且是唯一的和稳定的,则称此定解问题是**适定的**. 解的存在性与唯一性对于一个确定的物理过程来说是必需的. 否则就不符合客观物理过程. 在定解问题中,一些已知量,比如边界条件、初始条件以及方程右端的函数都是通过测量得到的,因此不可避免地存在一定的小误差. 解的稳定性是指当已知量发生微小的变化时,相应定解问题的解的偏差可以控制在任意给定的误差范围内.

在数学上,不适定的问题是存在的,下面是著名的 Hadamard 不适定问题:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0,\\ u\,|_{x=0}=0,u\,|_{y=0}=0,\\ u\,|_{x=\pi}=0,\dfrac{\partial u}{\partial y}\Big|_{y=0}=\dfrac{1}{n}\sin nx.\end{cases}$$

方程存在唯一解

$$u(x,y)=\frac{1}{n^2}\sin nx\,\mathrm{sh}ny.$$

显然,当 $n\to\infty$ 时,边界条件一致的趋近到 0,然而对于任何固定非零的 y,当 $n\to\infty$ 时,方程唯一的解 $u(x,y)=\dfrac{1}{n^2}\sin nx\,\mathrm{sh}ny$ 无界,因此解是不稳定的,这说明 Laplace 方程是不适定的.

尽管适定性对于定解问题的求解,以及对物理过程的确定都很重要,但这并不意味着非适定性的问题就没有用了,随着技术的发展,不适定问题也在实际应用中可以找到自己的位置,比如,利用静电场作物理探矿中就可以用到不适定的场位方程的初值问题.

另外,很长时间以来,人们认为对偏微分方程,如果不给定解条件,偏微分方程有很多解,比如,弦振动或者薄膜振动方程都有通解. 然而,事实上并非如此. 有人证明了,在方程中,若所有已知的函数(系数函数和右端的函数)都是解析的,上面的猜测是正确. 然而,即使方程中所有已知函数都是无穷阶可导的,也不能保证方程的解的存在. 1957 年 Levy 给出这样的例子,考虑方程

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\mathrm{i}\frac{\partial u}{\partial y}-2\mathrm{i}(x+\mathrm{i}y)\frac{\partial u}{\partial t}=f(t)$$

如果 $f(t)$ 的无穷阶导数存在,但不解析,此方程的解不存在,因为

定理：已知 $f(t)$ 是仅仅依赖于 t 的实连续函数，如果存在一个函数 $u(x,y,t)$ 是一阶可微的，并且在原点的某个邻域中满足上面的方程，则 $f(t)$ 关于 t 在原点附近是解析的.

1.4　二阶线性方程的分类

一般地，n 个自变量的二阶线性偏微分方程可表示为

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}(x_1,x_2,\cdots,x_n)\frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j}+\sum_{i=1}^{n} b_i(x_1,x_2,\cdots,x_n)\frac{\partial u}{\partial x_i}+cu=f.$$

当系数 a_{ij}，b_i，c 是常数时，称为常系数线性偏微分方程，否则称为变系数的. 当 $f=0$ 时，方程成为齐次方程，否则为非齐次的. 在本书中，一般讨论变量 $n=2$ 的情况，此时方程为

$$a_{11}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2a_{12}\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+a_{22}\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+b_1\frac{\partial u}{\partial x}+b_2\frac{\partial u}{\partial y}+cu=f. \tag{7}$$

通过适当的坐标变换，将方程(7) 化简，可以得到如下一阶常微分方程

$$a_{11}(\mathrm{d}y)^2-2a_{12}\mathrm{d}x\mathrm{d}y+a_{22}(\mathrm{d}x)^2=0. \tag{8}$$

定义：称一阶常微分方程(8) 为二阶线性偏微分方程(7) 的特征方程，称特征方程的积分曲线为二阶线性偏微分方程(7) 的特征曲线.

为了求解特征方程的积分曲线，可以化为

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\frac{a_{12}-\sqrt{a_{12}^2-a_{11}a_{22}}}{a_{11}},$$

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}=\frac{a_{12}+\sqrt{a_{12}^2-a_{11}a_{22}}}{a_{11}}$$

从上式可以得到，特征方程的解取决于它的判别式

$$\Delta=a_{12}^2-a_{11}a_{22}$$

在点(x_0,y_0)，如果 $\Delta>0$，则在此点有两条不同的实特征线，此时称方程在此点是双曲型方程；如果 $\Delta=0$，则在此点有两条相同的实特征线，此时称方程在此点是抛物型方程. 如果 $\Delta<0$，则在此点无实特征线，此时称方程在此点是椭圆型方程；如果在区域 Ω 内恒有 $\Delta>0$(或者 $\Delta=0$ 或者 $\Delta<0$)，则称方程在区域 Ω 内为双曲型方程(抛物型方程或者椭圆型方程). 否则称是混合型的.

例如，弦振动方程 $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，则 $\Delta=a^2>0$；一维热传导方程 $\frac{\partial u}{\partial t}=a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，则 $\Delta=0$；二维位势方程 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$，则 $\Delta=-1<0$.

1.5 Fourier 变换和离散 Fourier 级数

积分变换方法是求解偏微分方程的一种重要方法. 积分变换法通过函数的积分变换，把微分运算变为代数运算，可用于减少方程中自变量的个数，直到化为常微分方程或者代数方程求解. 在本书中，采用 Fourier 变换方法来讨论各种类型数值解法的算法稳定性问题. Fourier 变换也是工程技术上最重要的数学工具之一. 在此书中，将应用 Fourier 积分的分析方法讨论差分格式的稳定性. 首先回顾 Fourier 级数.

设 $f(x)$ 是以 2π 为周期的函数，形如 $\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos nx+b_n\sin nx)$ 的三角级数，称为 $f(x)$ 的 Fourier 级数，其中

$$a_n=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\cos nx\,\mathrm{d}x,(n=0,1,2,3,\cdots)$$

$$b_n=\frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)\sin nx\,\mathrm{d}x,(n=1,2,3,\cdots)$$

如果 $f(x)$ 是以 T 为周期的函数，在$[-\frac{T}{2},\frac{T}{2}]$上绝对可积，那么

$$f(x)\sim\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{\infty}(a_n\cos\frac{2n\pi}{T}x+b_n\sin\frac{2n\pi}{T}x)$$

其中 $$a_n=\frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}f(x)\cos\frac{2n\pi}{T}x\,\mathrm{d}x,(n=0,1,2,3,\cdots)$$

$$b_n=\frac{2}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}}f(x)\sin\frac{2n\pi}{T}x\,\mathrm{d}x,(n=1,2,3,\cdots)$$

称 a_n 和 b_n 为 Fourier 系数.

Riemann 定理：设函数 $\psi(u)$ 在$[a,b]$上可积和平方可积，那么下列极限式成立：

$$\lim_{p\to+\infty}\int_a^b\psi(u)\cos pu\,\mathrm{d}u=0,\ \lim_{p\to+\infty}\int_a^b\psi(u)\sin pu\,\mathrm{d}u=0.$$

定义：设函数 $f(x)$ 定义在实数 **R** 上，在任何有界区间上是分段光滑的，且在$(-\infty,+\infty)$内绝对可积. 则 $\forall w\in(-\infty,+\infty)$，称 $\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\mathrm{e}^{-iwx}\mathrm{d}x$ 是 $f(x)$ 的 Fourier 变换. 记为 $F(f)$ 或者$\hat{f}(w)$. 即 $F(f)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\mathrm{e}^{-iwx}\mathrm{d}x$. 称 $f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\hat{f}(w)e^{iwx}\mathrm{d}w$ 是 $f(x)$ 的 Fourier 逆变换.

Parseval 定理：如果$\hat{f}(w)$ 是 $f(x)$ 的 Fourier 变换，则$\int_{-\infty}^{+\infty}f^2(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\hat{f}^2(w)\mathrm{d}w$.

类似地，可以定义离散有限的 Fourier 级数.

定义:取 $x_i \in [a,b]$,是节点,称 $f(x_i) = \sum_{n=1}^{m-1} A_n \sin(n\pi x_i)$ 为 $f(x)$ 在区间$[a,b]$上关于节点 Ω_h 的有限 Fourier 级数展开式,A_n 称为 Fourier 系数.

定理:对于序列$\{\sin n\pi x_i\}_{n=1}^{m-1}$ 和$\{\sin n\pi x_j\}_{n=1}^{m-1}$,$i \neq j$,$x_i$,$x_j$ 为$[0,1]$上的等距节点,则有

$$\sum_{l=1}^{m-1} \sin(n\pi x_i)\sin(n\pi x_j) = 0, \quad h\sum_{n=1}^{m-1} \sin(n\pi x_i)^2 = \frac{1}{2}.$$

证明:由三角函数的积化和差公式

$$2\sum_{n=1}^{m-1} \sin(n\pi x_i)\sin(n\pi x_j) = \sum_{i=1}^{m-1} [\cos n\pi(x_i - x_j)] - \sum_{n=1}^{m-1} [\cos n\pi(x_i + x_j)]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\sin(m-\frac{1}{2})\pi(x_i - x_j)}{\sin\frac{1}{2}\pi(x_i - x_j)} - \frac{\sin(m-\frac{1}{2})\pi(x_i + x_j)}{\sin\frac{1}{2}\pi(x_i + x_j)}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\frac{\sin[(i-j)\pi - \frac{1}{2}\pi(x_i - x_j)]}{\sin\frac{1}{2}\pi(x_i - x_j)} - \frac{\sin[(i+j)\pi - \frac{1}{2}\pi(x_i + x_j)]}{\sin\frac{1}{2}\pi(x_i + x_j)}\right]$$

$$= \frac{1}{2}[-(1)^{i-j-1} - (-1)^{i+j-1}] = 0$$

$$2h\sum_{n=1}^{m-1} \sin^2(n\pi x_i) = h\sum_{n=1}^{m-1} [1 - \cos(2n\pi x_i)]$$

$$= (m-1)h - \frac{h}{2}\left[\frac{\sin 2(m-\frac{1}{2})\pi x_i}{\sin \pi x_i} - 1\right]$$

$$= (m-1)h - \frac{h}{2}\left[\frac{\sin(2m\pi x_i - \pi x_i)}{\sin \pi x_i} - 1\right]$$

$$= (m-1)h - \frac{h}{2}\left[\frac{\sin(2i\pi - \pi x_i)}{\sin \pi x_i} - 1\right]$$

$$= (m-1)h - \frac{h}{2}[-1-1] = mh = 1$$

即结论成立.

类似于无穷的 Fourier 级数,也有如下结论:

定理:对于有限 Fourier 级数,有

$$A_n = 2h\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\sin(n\pi x_i) \qquad 1 \leqslant n \leqslant m-1,$$

$$\sum_{n=1}^{m-1} A_n^2 = 2h\sum_{i=1}^{m-1} [f(x_i)]^2.$$

证明：因为 $f(x_i)=\sum_{n=1}^{m-1}A_n\sin(n\pi x_i)$

$$
\begin{aligned}
h\sum_{i=1}^{m-1}f(x_i)\sin(n\pi x_i) &= h\sum_{i=1}^{m-1}\left[\sum_{l=1}^{m-1}A_l\sin(l\pi x_i)\right]\sin(n\pi x_i)\\
&=\sum_{l=1}^{m-1}A_l h\sum_{i=1}^{m-1}\sin(l\pi x_i)\sin(n\pi x_i)\\
&=\sum_{l=1}^{m-1}A_l\left[h\sum_{i=1}^{m-1}\sin(i\pi x_n)\sin(i\pi x_l)\right]\\
&=A_n h\sum_{i=1}^{m-1}\sin(i\pi x_n)\sin(i\pi x_n)\\
&=\frac{1}{2}A_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
2h\sum_{i=1}^{m-1}[f(x_i)]^2 &= 2h\sum_{i=1}^{m-1}\left[\sum_{n=1}^{m-1}A_n\sin(n\pi x_i)\right]^2\\
&=\sum_{i=1}^{m-1}h\sum_{n=1}^{m-1}\sum_{l=1}^{m-1}A_l A_n\sin(l\pi x_i)\sin(n\pi x_i)\\
&=\sum_{n=1}^{m-1}\sum_{n=1}^{m-1}A_l A_n\left[h\sum_{i=1}^{m-1}\sin(l\pi x_i)\sin(n\pi x_i)\right]\\
&=\sum_{n=1}^{m-1}A_n^2 h\sum_{i=1}^{m-1}\sin^2(n\pi x_i)=\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{m-1}A_n^2.
\end{aligned}
$$

1.6 复数矩阵基本概念和性质

设矩阵 $\boldsymbol{A}=(c_{ij})_{m\times n}$，其中 $c_{ij}\in\mathbf{C}$，则 $\boldsymbol{A}$ 的共轭转置是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=(\overline{c_{ji}})_{n\times m}$.

如果 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$，满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为酉矩阵；如果 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$，满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermite 矩阵. 如果 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$，满足 $\boldsymbol{A}^H\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^H$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵.

定理：若 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$，则 $\|\boldsymbol{A}\|_2=\sqrt{\rho(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})}$，其中 $\boldsymbol{\rho}(\cdot)$ 是矩阵的谱半径.

定理：对于 Hermite 矩阵 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$，存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$ 使

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值.

定理：设矩阵 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$，$\boldsymbol{A}$ 是正规阵的充要条件是存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}\in \boldsymbol{C}^{n\times n}$ 使

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$$

其中 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值.

1.7　差分方法的基本概念

差分方法又称为有限差分方法或网格法，是求偏微分方程定解问题的数值解中应用最广泛的方法之一.

它的基本思想是：先对求解区域作网格剖分，将自变量的连续变化区域用有限离散点（网格点）集代替；将问题中出现的连续变量的函数用定义在网格点上离散变量的函数代替；通过用网格点上函数的差商代替导数（或者用其他方法来近似导数），将含连续变量的偏微分方程定解问题化成只含有限个未知数的代数方程组（称为差分格式）. 然后求解代数方程组，得到由定解问题的解在离散点集上的近似值组成的离散解；最后利用插值方法，可从离散解得到定解问题在整个区域上的近似解.

如果差分格式有解，且当网格无限变小时，其解收敛于原微分方程定解问题的解，则差分格式的解就作为原问题的近似解（数值解）. 因此，用差分方法求偏微分方程定解问题一般需要解决以下问题：

(1) 选取网格. 利用网格线将定解区域化为离散化的节点集，是微分方程定解问题离散化为差分方程的基础. 一般来说，由于解的问题各不相同，导致求解区域的不同，网格划分也不尽相同. 所以要选取适当的网格；

(2) 对微分方程及定解条件选择差分近似，列出差分格式. 不同的离散化途径得到不同的差分格式；

(3) 求解差分格式；

(4) 讨论差分格式的解对于微分方程解的收敛性及误差估计.

以一维为例进行说明. 首先对定解区域 $D=\{(x,t)\mid -\infty<x<+\infty, t\geqslant 0\}$ 作网格剖分，最简单常用的一种网格是用两族分别平行于 x 轴与 t 轴的等距直线 $x=x_j=jh, t=t_n=n\tau; j=1,2,\cdots,M, n=1,\cdots,N$，将 D 分成许多小矩形区域. 这些直线称为网格线，其交点称为网格点，也称为节点，h 和 τ 分别称作 x 方向和 t 方向的步长. 这种网格称为矩形网格，如图 1.2 所示.

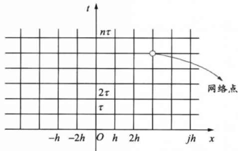


图 1.2　矩形网格

将定解区域剖分成矩形网格.节点的全体记为

$$S = \{(x_j, t_n) \mid x_j = jh, t_n = n\tau, j, n \text{ 为非负整数.}\}$$

定解区域Ω内部的节点称为内点,记内点集为$\Omega_{h\tau}$.边界Γ与网格线的交点称为边界点,边界点全体记为$\Gamma_{h\tau}$.与节点(x_j, t_n)沿x方向或t方向只差一个步长的点$(x_{j\pm1}, t_n)$和$(x_j, t_{n\pm1})$称为节点(x_j, t_n)的相邻节点.如果一个内点的四个相邻节点均属于$\Omega \cup \Gamma$,称为正则内点,正则内点的全体记为$\Omega^{(1)}$,至少有一个相邻节点不属于$\Omega \cup \Gamma$的内点称为非正则内点,非正则内点的全体记为$\Omega^{(2)}$.如图 1.3 所示,"○"表示正则内点,"×"表示非正则内点.

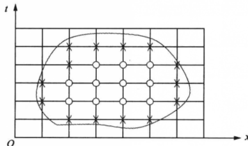


图 1.3

第 2 章　抛物方程的差分格式

在研究热传导过程、气体膨胀过程和电磁场的传播等问题时，常遇到抛物类型的偏微分方程. 在这类问题的自变量中，存在一个时间变量，通常描述的是随时间变化的物理过程，也即所谓的不定常的物理过程.

在本章中，我们将从不同的角度来介绍如何构造偏微分方程适当的差分格式.

2.1　常系数扩散方程的三种古典差分格式

考虑一维非齐次热传导的定解问题

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x,t),\quad 0 < x < 1, T \geqslant t > 0,$$

$$u(x,0) = \varphi(x),\quad 0 < x < 1,$$

$$u(0,t) = \varphi_1(t),\quad u(1,t) = \varphi_2(t),\quad 0 < t \leqslant T.$$

1. 最简显格式

方法 1：Taylor 公式方法

首先定义离散的定解区域 Ω_h 上的网格函数

$$U = \{u_j^k \mid 0 \leqslant j \leqslant M, 0 \leqslant k \leqslant N\},$$

其中 $u_j^k = u(x_j, t_k), 0 \leqslant j \leqslant M, 0 \leqslant k \leqslant N$.

考虑微分方程(1) 在节点(x_j, t_k) 的取值，有

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k) - a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k) = f(x_j,t_k), 1 \leqslant j \leqslant M-1, 1 \leqslant k \leqslant N-1. \tag{1}$$

由 Taylor 展开公式有

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k) = \frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{k+1}) - u(x_j,t_k)] + \frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\eta_k), t_k \leqslant \eta_k \leqslant t_{k+1}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{a}{h^2}[u(x_{j+1},t_k) - 2u(x_j,t_k) + u(x_{j-1},t_k)] + \frac{ah^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_j,t_k),$$
$$x_{j-1} \leqslant \xi_j \leqslant x_{j+1}. \tag{3}$$

将(2)(3)代入到(1)中,得到

$$\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)]-\frac{a}{h^2}[u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)]$$

$$=f(x_j,t_k)+\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\eta_k)-\frac{ah^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_j,t_k).$$

忽略上式右边的高阶无穷小量,得到如下近似等式

$$\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)]-\frac{a}{h^2}[u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)]\approx f(x_j,t_k).$$

用"="代替"≈"得到差分格式

$$\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)]-\frac{a}{h^2}[u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)]=f(x_j,t_k).$$

$$1\leqslant j\leqslant M-1,\leqslant k\leqslant N-1.$$

记 $r=\frac{\tau}{h^2}$,称为网格比,将上面的格式改写为

$$u_j^{k+1}=(1-2ar)u_j^k+ar(u_{j+1}^k-u_{j-1}^k)+\tau f_j^k,\quad j=1,2,\cdots,k=1,2,\cdots.$$

被忽略的无穷小量,称为局部截断误差,记为

$$R_j^k=\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\eta_k)-\frac{ah^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_j,t_k),$$

或者记为 $O(\tau+h^2)$.

用矩阵表示方程组,记

$$\boldsymbol{U}^k=(u_1^k,u_2^k,\cdots,u_{M-1}^k)^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{F}^k=(f_1^k,f_2^k,\cdots,f_{M-1}^k)^{\mathrm{T}},$$

则可以表示为

$$\boldsymbol{U}^{k+1}=[ar\boldsymbol{C}+(1-2ar)\boldsymbol{I}]U^k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^k+\tau F^k,$$

其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1-2ar & ar & & & \\ ar & 1-2ar & ar & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & ar & 1-2ar & ar \\ & & & ar & 1-2ar\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{C}=\begin{pmatrix}0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0\end{pmatrix}.$$

其节点结构如图 2.1 所示:

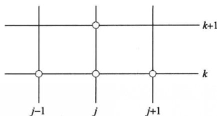


图 2.1　节点结构图

方法 2:差商法

构造特点是用一阶向前差商近似在时间方向的微商,用二阶中心差商近似在空间方向上的二阶微商,得到差分方程.

还是考虑微分方程在节点(x_j,t_k)的取值,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)=0,1\leqslant j\leqslant M-1,0\leqslant k\leqslant N-1.$$

定义如下差商:

在时间方向的向前差商

$$\frac{u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)}{t_{k+1}-t_k},$$

在空间方向的二阶中心差商

$$\frac{u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)}{(x_{j+1}-x_j)^2}.$$

不妨假设在空间和时间上都是等步长的,于是得到差分格式

$$\frac{1}{\tau}(u_j^{k+1}-u_j^k)=\frac{a}{h^2}(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)+f_j^k,1\leqslant j\leqslant M-1,0\leqslant k\leqslant N-1.$$

所以最简显格式也称为向前差分格式.

算例 1:应用最简显差分格式计算如下问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2},0<x<1,t>0,\\ u(x,0)=\mathrm{e}^{-x},0<x<1,\\ u(0,t)=\mathrm{e}^{t},u(1,t)=\mathrm{e}^{-1+t},t>0.\end{cases}$$

方程的精确解为$u(x,t)=\mathrm{e}^{-x+t}$,它的曲面图像如图 2.2 所示.

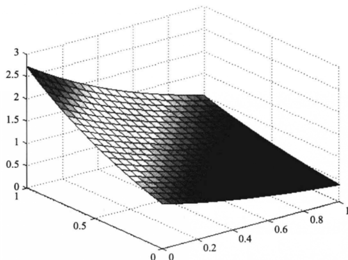


图 2.2　真解曲面图像

当取时间步长 $\tau = \frac{1}{100}$,空间步长 $h = \frac{1}{5}$ 时,计算结果如图 2.3 所示.

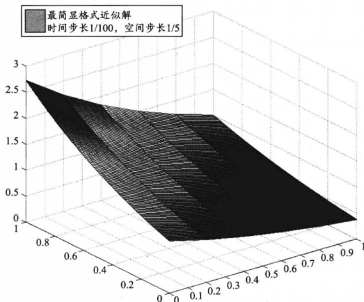


图 2.3　近似解曲面图

此时的误差曲面图如图 2.4 所示.

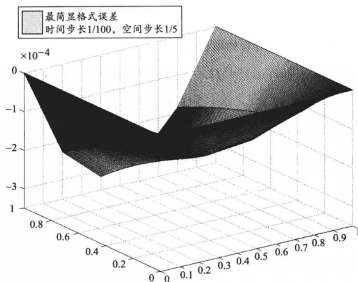


图 2.4 误差曲面图

当 $t=0.2$ 时数值结果如图 2.5 所示.

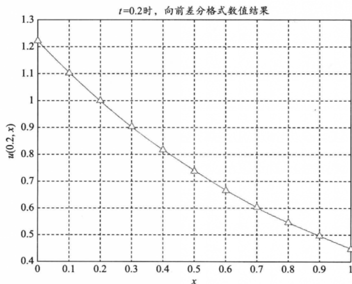


图 2.5 数值结果

2. 最简隐格式

方法 1:Taylor 公式法

在节点(x_j,t_k)处,考虑微分方程的取值,即

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)=f(x_j,t_k),1\leqslant j\leqslant M-1,1\leqslant k\leqslant N-1.$$

利用 Taylor 公式,把$u(x_j,t_{k-1})$在(x_j,t_k)点展开,有

$$u(x_j,t_{k-1})=u(x_j,t_k)-\tau u_t(x_j,t_k)+\frac{\tau^2}{2}u_{tt}(x_j,\eta_k),t_{k-1}\leqslant \eta_k\leqslant t_k,$$

空间上的偏导数与最简显格式相同,于是得到格式

$$\frac{1}{\tau}(u_j^k-u_j^{k-1})=\frac{a}{h^2}(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)+f_j^k,1\leqslant j\leqslant M-1,1\leqslant k\leqslant N,$$

即 $u_j^k-ar(u_{j-1}^k-2u_j^k+u_{j+1}^k)=u_j^{k-1}+\tau f_j^k,1\leqslant j\leqslant M-1,1\leqslant k\leqslant N.$

最简隐格式的局部截断误差为

$$R_j^k=\frac{\tau}{2}u_{tt}(x_j,\eta_k)-\frac{ah^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_j,t_k),$$

或者记为$O(\tau+h^2)$.

方程组的矩阵表示形式为

$$\boldsymbol{AU}^{k+1}=\boldsymbol{U}^k+\tau\boldsymbol{F}^{k+1},$$

其中$\boldsymbol{A}=[(1+2ar)\boldsymbol{I}+r\boldsymbol{C}]$,

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1+2ar & -ar & & & \\ -ar & 1+2ar & -ar & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -ar & 1+2ar & -ar \\ & & & -ar & 1+2ar\end{pmatrix}.$$

其节点结构图如图 2.6 所示

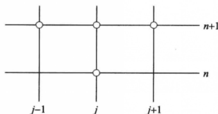


图 2.6 节点结构图

方法 2:差商法

构造特点是用一阶向后差商代替时间方向的微商,用二阶中心代替在空间上的二阶微商,得到差分方程.

定义向后差商

$$\frac{u(x_j,t_k)-u(x_j,t_{k-1})}{t_k-t_{k-1}}.$$

用与最简显格式类似的差商法得到最简隐格式.也称为向后差分格式.

算例 2:考虑算例 1 的方程,用最简隐格式求近似解.当取不同的时间步长、空间步长时,计算近似结果如图 2.7 ～ 图 2.11 所示.

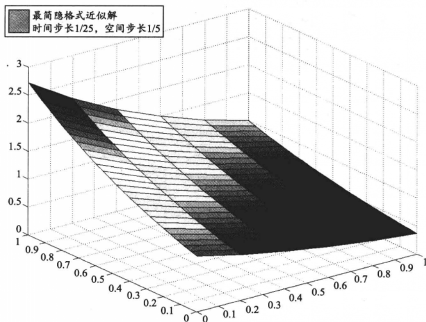


图 2.7　近似解曲面图

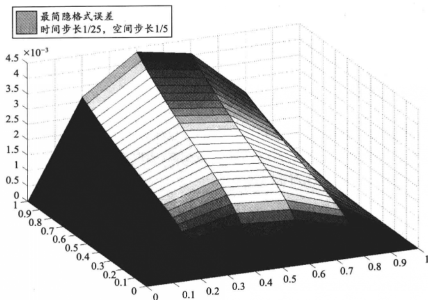


图 2.8　误差曲面图

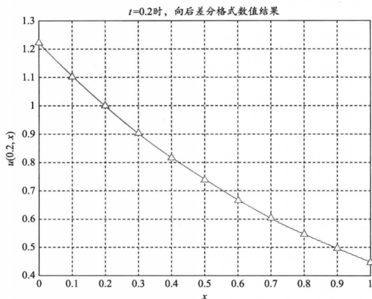


图 2.9　向后差分格式的数值结果

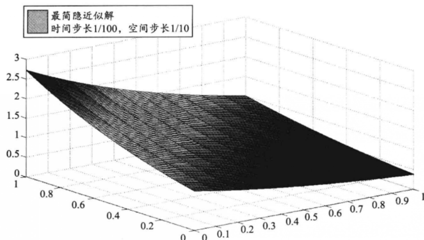


图 2.10　近似解曲面图

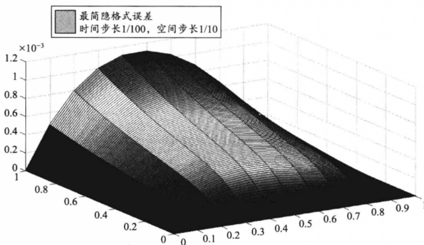


图 2.11　误差曲面图

3. Richardson 格式

从前面的两个格式的讨论可知，它们的局部截断误差是 $O(\tau+h^2)$，即关于时间上的误差是一阶的，空间的误差是二阶的. 从差商法的方法角度考虑，在差商法中，使用向前差商或者向后差商近似时间方向的偏导数值，这种近似方法的误差的阶是一阶的. 所以，差分格式的局部

截断误差也是一阶. 为了提高局部误差的精度,很显然,如果在时间方向使用一阶中心差商,就可以得到更高阶的误差精度 —— 二阶精度,即 $O(\tau^2+h^2)$.

还是在节点(x_j,t_k)处考虑抛物类型问题,空间方向的讨论与最简显隐格式相同,主要针对时间方向的偏导数. 利用 Taylor 公式,把 $u(x_j,t_{k-1})$ 和 $u(x_j,t_{k+1})$ 分别在(x_j,t_k)点展开,即

$$u(x_j,t_{k+1})=u(x_j,t_k)+\tau\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)+\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_{j-1},t_k)+\frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\xi_{1k}),t_k\leqslant\xi_{1k}\leqslant t_{k+1},$$

$$u(x_j,t_{k-1})=u(x_j,t_k)-\tau\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)+\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j,t_k)-\frac{\tau^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\xi_{2k}),t_{k-1}\leqslant\xi_{2k}\leqslant t_k,$$

上面两式相减,并利用连续函数的介值定理,得到

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)=\frac{u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_{k-1})}{2\tau}-\frac{\tau^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\xi_k),t_{k-1}\leqslant\xi_k\leqslant t_{k+1},\tag{4}$$

由(1),(3) 和(4) 得到

$$\frac{u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_{k-1})}{2\tau}=\frac{1}{h^2}[u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)]+f(x_j,t_k)$$
$$-a\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\rho_j,t_k)-\frac{\tau^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\xi_k),$$

忽略无穷小量项,得到

$$\frac{1}{2\tau}(u_j^{k+1}-u_j^{k-1})=\frac{a}{h^2}(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)+f_j^k,1\leqslant j\leqslant M-1,1\leqslant k\leqslant N-1,$$

它的矩阵形式是

$$\boldsymbol{U}^{k+1}=\boldsymbol{U}^{k-1}+2r(\boldsymbol{C}-2\boldsymbol{I})\boldsymbol{U}^k+2\tau\boldsymbol{F}^k.$$

Richardson 是一个三层格式,只有同时利用到 $k-1$ 和 k 层的全部数值解才可能求 $k+1$ 层上的数值解. 其节点结构图如图 2.12 所示.

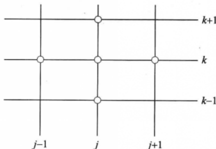


图 2.12　节点结构图

算例 3:考虑算例 1 的方程. 用 Richardson 格式求近似解. 它的数值结果和误差曲面如图 2.13、图 2.14 所示.

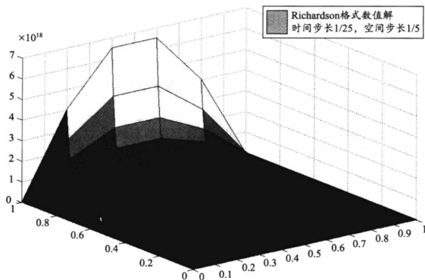


图 2.13　近似解曲面图

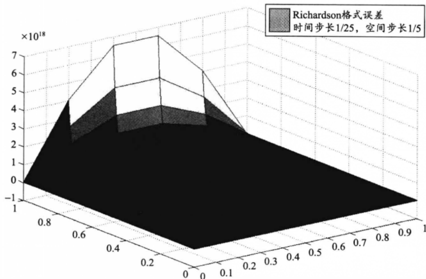


图 2.14　误差曲面图

2.2 稳定性、相容性、收敛性

本节讨论差分格式的一些理论问题，给出差分格式的收敛性、稳定性和相容性的概念，以及它们之间的关系.

假设差分格式已经建立，自然会产生如下问题：差分方程是否是对原微分方程的近似（相容性）？微分方程的差分格式的解是否能作为原微分方程的解的近似（收敛性）？以及计算过程中，误差对解有什么影响（稳定性）？

为什么要讨论这些问题呢？因为，一般来说，微分方程的右端项 $f(x,t)$、初值条件 $\varphi(x)$ 以及边值条件 $\varphi(t)$ 都是通过测量、资料统计或者一些理想化运算取得的，是不可避免带有误差的. 如果差分方程的解不能连续地依赖右端项 $f(x,t)$、初值条件 $\varphi(x)$ 以及边值条件 $\varphi(t)$，那么在计算中会出现下面的现象：以带有误差的量进行计算所得到的结果，与不带误差的量进行计算所得到的结果，它们之间的差别很大，从而导致计算出来的结果不能作为真解的近似. 另外，即使右端项 $f(x,t)$、初值条件 $\varphi(x)$ 以及边值条件 $\varphi(t)$ 这些量都是准确无误的，但在计算中也有计算机本身的舍入误差，也会导致近似解与真解之间巨大的差别. 所以一个不稳定的差分格式或者算法是没有使用价值的. 差分格式的收敛性也是如此，如果差分格式没有收敛性，当网格充分小时，差分格式的解与微分方程的解不能充分接近，此时怎么能期望所计算的数值解是真解的良好近似？在讨论这些问题之前，首先要给出概念 —— 问题的适定性.

考虑方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}-a\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t), \quad a>0,t>0,x\in R,\\ u(x,0)=\varphi(x),x\in R.\end{cases}$$

或者其他边界条件.

如果上面的问题满足

(1) 对于任何属于某个函数集合的 $\varphi(x)$，以 $\varphi(x)$ 为初值条件，方程的解是存在而且唯一的；

(2) 存在常数 c，使得对任何 $t>0$，都有

$$\| u(x,t) \| \leqslant c \| u(x,0) \| = c \| \varphi(x) \| ,$$

则称此问题是适定的.

1. 稳定性

抛物型方程的差分格式在实际计算中都是按照时间层逐层推进的. 以两层格式为例，在计

算第 $k+1$ 层的值 u_j^{k+1} 时，要用到第 k 层计算结果的值 $u_{j-l}^k, u_{j-l+1}^k, \cdots, u_{j+l}^k$，而这些值的计算误差，必然会传递到 u_j^{k+1}，然后误差逐层传递. 所以，有必要分析这种误差传递的情况，也即稳定性的研究. 以下面的例子来说明差分格式的稳定性.

考虑齐次扩散方程的二层显式格式

$$u_j^{k+1} = u_j^k + ar(u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k),$$

设计算到第 $k-1$ 层，误差为零，而到第 k 层时，只在节点 (x_j, t_k) 出现误差 ε，其余节点没有误差. 那么以后各层的节点的误差 e_j^k 满足

$$e_j^{k+1} = e_j^k + ar(e_{j+1}^k - 2e_j^k + e_{j-1}^k).$$

取 $ar = 1$，误差传播情况如下表：

$$\begin{bmatrix}
 & & & & x_{j-2} & x_{j-1} & x_j & x_{j+1} & x_{j+2} & & & \\
\cdots & 0 & \cdots & \cdots & & & & & & & & \\
t_k & 0 & \cdots & & & 0 & \varepsilon & 0 & & & & \\
t_{k+1} & 0 & \cdots & & 0 & \varepsilon & -\varepsilon & \varepsilon & 0 & & & \\
t_{k+2} & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon & -2\varepsilon & 3\varepsilon & -2\varepsilon & \varepsilon & 0 & & \\
t_{k+3} & 0 & \cdots & \varepsilon & -3\varepsilon & 6\varepsilon & -7\varepsilon & 6\varepsilon & -3\varepsilon & \varepsilon & \cdots & 0
\end{bmatrix}.$$

从上面的表格，很显然得到，随着时间层的推进，误差越来越大，肯定会掩盖真实结果. 表明在 $ar = 1$ 时，显式格式是不稳定的.

取 $ar = \dfrac{1}{2}$，误差传播情况如下表：

$$\begin{bmatrix}
 & & & x_{j-3} & x_{j-2} & x_{j-1} & x_j & x_{j+1} & x_{j+2} & x_{j+3} & & \\
\cdots & 0 & \cdots & \cdots & & & & & & & & \\
t_k & 0 & \cdots & & & 0 & \varepsilon & 0 & & & & \\
t_{k+1} & 0 & \cdots & & 0 & \frac{1}{2}\varepsilon & 0 & \frac{1}{2}\varepsilon & 0 & & & \\
t_{k+2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{4}\varepsilon & 0 & \frac{1}{2}\varepsilon & 0 & \frac{1}{4}\varepsilon & 0 & & \\
t_{k+3} & 0 & \cdots & \frac{1}{8}\varepsilon & 0 & \frac{3}{8}\varepsilon & 0 & \frac{3}{8}\varepsilon & 0 & \frac{1}{8}\varepsilon & \cdots & 0
\end{bmatrix}.$$

从上表可以看出，误差越来越小，说明显式格式是稳定的.

考虑齐次扩散方程的三层 Richardson 格式

$$u_i^{k+1} - u_i^{k-1} = 2ar(u_{i+1}^k - 2u_i^k + u_{i-1}^k),$$

取 $ar=\dfrac{1}{2}$，节点的误差 e_j^k 满足

$$e_j^{k+1}=\frac{1}{2}(e_j^k+e_j^{k-1}).$$

还是类似于显格式的假设，在节点(x_j,t_k)出现误差 ε，其余节点没有误差. 误差传播情况如下表

$$\left[\begin{array}{cccccccccccc}
 & & & x_{j-3} & x_{j-2} & x_{j-1} & x_j & x_{j+1} & x_{j+2} & x_{j+3} & & \\
\cdots & 0 & \cdots & \cdots & & & & & & & & \\
t_k & 0 & \cdots & & & 0 & \varepsilon & 0 & & & & \\
t_{k+1} & 0 & \cdots & & 0 & \varepsilon & -2\varepsilon & \varepsilon & 0 & & & \\
t_{k+2} & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon & -4\varepsilon & 7\varepsilon & -4\varepsilon & \varepsilon & 0 & & \\
t_{k+3} & 0 & \cdots & \varepsilon & -6\varepsilon & 17\varepsilon & -24\varepsilon & 17\varepsilon & -6\varepsilon & \varepsilon & \cdots & 0
\end{array}\right],$$

从上面实例的两种情况来看，差分格式的稳定是需要条件的.

对于一般线性双层格式可写为

$$\sum_l a_l u_{j+l}^{k+1}=\sum_p b_p u_{j+p}^k+\tau f_j^k,$$

或者写为矩阵形式

$$\boldsymbol{AU}^{k+1}=\boldsymbol{BU}^k+\tau\boldsymbol{F}^k. \tag{5}$$

为了给这些模糊的语言（比如趋近于、接近于和误差控制）赋予精确的数学含义. 另外，为了给稳定性、相容性以及收敛性准确的数学语言的描述，也即它们的定义，它们都需要一种适合的度量标准. 在数值分析中，讨论各种近似算法的误差，一般是讨论每个点的误差，可以直接把绝对值作为度量的标准. 在偏微分方程中，对每个时间层，我们得到的是一组数据，为了从整体上判断这些离散数据的有效性，需要引入新的度量标准 —— 离散范数. 下面给出三种常用的离散范数的定义.

$$U^k=(u_1^k,u_2^k,\cdots,u_M^k),$$

欧氏范数：$\|U^k\|=\sum\limits_{j=1}^M|u_j^k|^2h$；

最大范数：$\|U^k\|_\infty=\max\limits_{1\leqslant j\leqslant M}|u_j^k|$；

$1-$范数：$\|U^k\|_1=\sum\limits_{j=1}^M|u_j^k|$.

定义：称差分格式(5)是按范数 $\|\cdot\|$ 关于初值稳定的，如果存在常数 $M>0,\tau_0>\tau>0$，

使得与之相应的齐次方程的解满足不等式

$$\| U^k \| \leqslant M \| U^0 \| , \forall 0 < k < T/\tau.$$

定义:称差分格式(5) 是按范数 $\| \cdot \|$ 关于右端稳定的,如果存在 $\tau_0 > \tau > 0$,使得适合 $U^0 = 0$ 初值条件的解 U^k,满足不等式

$$\| U^k \| \leqslant M\tau \sum_{l=0}^{k-1} \| F^l \| , 0 < \forall k < T/\tau,$$

其中 M 是与 τ 无关的常数.

定理:如果差分方程(5) 是按范数 $\| \cdot \|$ 关于初值稳定的,则其也是按范数 $\| \cdot \|$ 关于右端稳定的.

注:从上面定理有,差分方程的稳定性的讨论可以归结为初值稳定,而且是齐次方程的初值稳定.因此,在以后的章节中,差分方程的稳定性都是指相应的齐次方程的初值稳定.

2. 相容性

定义:如果当 $\tau \to 0$ 和 $h \to 0, k\tau \to t$ 时,微分方程的解 u 充分光滑,差分格式的局部截断误差 $R_j^k \to 0$,即有

$$\| R_j^k \| = \| L_h[u]_j^k - [Lu]_j^k \| \to 0$$

则称差分格式与微分方程相容.其中 $L_h[u]_j^k$ 和 $[Lu]_j^k$ 分别表示差分方程和微分方程在节点 (x_j, t_k) 的取值.

3. 收敛性

定义:设 $u(x,t)$ 是微分方程的真解,u_j^k 是相应差分方程的真解.如果当 $\tau \to 0, h \to 0$ 时,

$$e_j^k = u(x_j, t_k) - u_j^k \to 0$$

则称差分格式是收敛的.即差分格式的解在网格步长趋近于零时,差分方程的解逼近真解.

注:差分格式的收敛性问题在实际应用中是很重要的问题.一般来说,不收敛的差分格式无实用价值,因此,在编写程序实现计算之前,最好对收敛性的问题给出明确的答复.

下面的定理指出,从格式的相容性与稳定性可以推出差分的收敛性.

定理(Lax **等价定理**):给定一个适定的线性初值问题,如果逼近它的差分格式是与它相容的,那么差分格式的收敛性是差分格式稳定性的充分必要条件.此外,如果

$$R_j^k = O(\tau^m + h^n), \quad r_j^k = f(x_i, t_k) - f_j^k = O(\tau^m + h^n), \quad m, n > 0,$$

则有

$$\| U^k - u(x, t_k) \| = O(\tau^m + h^n),$$

其中 $u(x,t_k)$ 是微分方程的真解，U^k 是差分格式的真解.

使用这个定理时必须注意以下条件：

(1) 问题是初值问题，包括周期性边界条件的初边值问题；

(2) 初值问题必须是适定的；

(3) 初值问题是线性的，非线性问题一般没有这样简洁的关系.

Lax 定理有十分重要的实用意义. 因为，很显然，一个差分格式的相容性是很容易验证的，而一般差分格式收敛性的证明却是很困难的. 应用 Lax 定理，将判断差分格式收敛性的问题转化为判断其稳定性问题. 事实上，判断一个差分格式的稳定性，有很多方法和准则. 所以，无论从实际应用还是理论上，格式的稳定性成了讨论的重点.

2.3 判别稳定性的 Fourier 分析方法

因为网格函数 u_j^k 和 f_j^k 只是在网格节点处有意义，为了使用 Fourier 分析方法，必须对这些网格函数的定义域进行扩充，使它们在全体实数上都有意义. 具体作法就是构造一系列分段常数函数，即阶梯函数. 具体函数形式如下：

$$U(x,t_k) = u_j^k, \quad (j-\frac{1}{2})h \leqslant x < (j+\frac{1}{2})h,$$

$$F(x,t_k) = f_j^k, \quad (j-\frac{1}{2})h \leqslant x < (j+\frac{1}{2})h.$$

下面以两层显式格式来说明 Fourier 分析方法.

$$u(x_j,t_{k+1}) = u(x_j,t_k) - ar[u(x_j,t_k) - u(x_{j-1},t_k)],$$

根据前面的函数延拓，则有

$$U(x,t_{k+1}) = U(x,t_k) - ar[U(x,t_k) - U(x-h,t_k)], \tag{6}$$

利用 Fourier 逆变换有

$$U(x,t_{k+1}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_{k+1})e^{iwx}\,dw,$$

$$U(x,t_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)e^{iwx}\,dw,$$

$$U(x-h,t_k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)e^{iw(x-h)}\,dw,$$

把上面三式代入(6) 得到

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_{k+1})e^{iwx}dw=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)e^{iwx}dw-ar\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)e^{iwx}dw-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)e^{iw(x-h)}dw\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\widehat{U}(w,t_k)[1-ar(1-e^{iwh})]e^{iwx}dw$$

由函数系$\{e^{iwx}\}$的线性无关性有

$$\widehat{U}(w,t_{k+1})=\widehat{U}(w,t_k)[1-ar(1-e^{iwx})],$$

记 $G(r)=1-ar(1-e^{iwh})$，称为传播因子或者增长因子.

下面讨论差分稳定的判别准则.

定理:双层差分格式(5) 稳定的充要条件是:存在常数 $M>0$,对任何 $0<\tau\leqslant\tau_0$, $k\tau\leqslant T$ 有

(1) $|G(r)|^k\leqslant M$ 或者

(2) $|G(r)|\leqslant 1+c\tau$,其中 c 是与 h,τ 无关的常数. 此条件称为 Von Neumann 条件.

下面用Fourier分析方法应用上述定理讨论显式格式、隐式格式和Richardson格式此三种古典格式的稳定性.

1. 最简显格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0.$$

在实际的计算中,没有必要像前面讨论的那样得到传播因子,实际上只要令 $u_j^k=v^k e^{iwjh}$ 代入差分格式中,即可计算传播因子.

$$v^{k+1}e^{iwjh}-v^k e^{iwjh}-ar(v^k e^{iw(j+1)h}-2v^k e^{iwjh}+v^k e^{iw(j-1)h})=0,$$

$$\Rightarrow(v^{k+1}-v^k)e^{iwjh}-arv^k e^{iwjh}(e^{iwh}-2+e^{-iwh})=0$$

$$\Rightarrow v^{k+1}=v^k+arv^k(e^{iwh}-2+e^{-iwh})$$

$$\Rightarrow v^{k+1}=v^k(1-4ar\sin^2\frac{wh}{2}),$$

得到传播因子为 $G(r)=1-4ar\sin^2\frac{wh}{2}$.

根据定理有 $|G(r)|=|1-4ar\sin^2\frac{wh}{2}|\leqslant 1$,得到 $ar\leqslant\frac{1}{2}$. 即当 $ar\leqslant\frac{1}{2}$ 时,传播因子满足 Von Neumann 条件,因此 $ar\leqslant\frac{1}{2}$ 时,最简显格式稳定.

2. 最简隐格式

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\tau} - a\frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} = 0,$$

令 $u_j^k = v^k e^{i\omega jh}$ 代入差分格式中，并且整理得到

$$v^k[(1+2ar) - ar(e^{i\omega h} + e^{-i\omega h})] = v^{k-1},$$

传播因子 $\boldsymbol{G}(r) = \dfrac{1}{1+2ar(1-\cos\omega h)}$.

很显然，不等式 $|\boldsymbol{G}(r)| = \left|\dfrac{1}{1+2ar(1-\cos\omega h)}\right| \leqslant 1$ 恒成立. 因此，隐格式的稳定性与网格比无任何关系，此时，称格式无条件稳定或者绝对稳定.

对于抛物型微分方程组

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} = A\frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial x^2}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 是常系数矩阵，$\boldsymbol{U}$ 是向量.

它的两层格式的一般形式可以写成

$$\sum_l \boldsymbol{A}_l \boldsymbol{U}_{j+l}^{k+1} = \sum_p \boldsymbol{B}_p \boldsymbol{U}_{j+p}^k, \tag{7}$$

其中 $\boldsymbol{A}_l$ 和 $\boldsymbol{B}_p$ 都是矩阵.

按照 Fourier 分析方法，同理可得到类似单个方程时的式子

$$V^{k+1} = \boldsymbol{G}(r)V^k,$$

这里的 $\boldsymbol{G}(r)$ 不是一个元素，是一个矩阵，称为传播矩阵.

定理：两层差分格式方程组(7)稳定的充要条件是对任何 $0 < \tau \leqslant \tau_0, k\tau \leqslant T$，存在常数 $M > 0$，使得 $\|\boldsymbol{G}(r)\|^k \leqslant M$.

定理：两层差分格式方程组(7)稳定的必要条件是对任何 $0 < \tau \leqslant \tau_0, k\tau \leqslant T$，

$$\rho(\boldsymbol{G}(r)) \leqslant 1 + c\tau,$$

其中 c 是与 h, τ 无关的常数，$\rho(\boldsymbol{G}(r))$ 表示传播矩阵的谱半径. 上面的条件也称为 Von Neumann 条件.

对于差分方程组来说，Von Neumann 条件只是稳定的必要条件，不是充要条件. 但是它仍然是很重要的，其重要性在于，在很多的情况下，这个条件也是稳定性的充分条件.

定理：设传播矩阵 $\boldsymbol{G}(r)$ 是 n 阶方矩阵

(1) 若 $\boldsymbol{G}(r)$ 有 n 个不同的特征值，则 Von Neumann 条件是差分格式组稳定的充要条件；

(2) 若 $\boldsymbol{G}(r)$ 的特征值有重根，但它的谱半径小于 1，则差分格式组稳定.

定理：如果差分格式(7)的传播矩阵 $\boldsymbol{G}(r)$ 是正规阵，那么 Von Neumann 条件是格式稳定

的充要条件.

定理:差分格式(7) 的传播矩阵为 $\boldsymbol{G}(r)$,如果存在可逆矩阵 $\boldsymbol{S}$,使得

$$\boldsymbol{SGS}^{-1}=\boldsymbol{D},\ \|\boldsymbol{S}\|\leqslant c_1,\ \|\boldsymbol{S}^{-1}\|\leqslant c_2$$

其中 $\boldsymbol{D}$ 是对角阵,则 Von Neumann 条件是差分方程组的稳定的充要条件.

3. Richardson 格式的稳定性

$$u_j^{k+1}=u_j^{k-1}+2ar(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k),$$

这是一个三层格式,不能直接应用两层格式的办法来讨论其稳定性. 为了应用两层格式的结论,必须将三层格式化为两层格式方程组. 如何实施呢?利用向量形式,将相邻两层合成一层,具体方法只要再补充一个方程就可以转化为一个方程组,添加的方程式是恒等式 $u_j^k=u_j^k$,于是有下面的方程组和三层格式等价.

$$\begin{cases}u_j^{k+1}=u_j^{k-1}+2ar(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k),\\ u_j^k=u_j^k.\end{cases}$$

令 $\boldsymbol{U}_j^{k+1}=(u_j^{k+1},u_j^k)^{\mathrm{T}}$,则上述方程组的矩阵形式

$$\boldsymbol{U}_j^{k+1}=\begin{pmatrix}2ar & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_{j+1}^k+\begin{pmatrix}-4ar & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_j^k+\begin{pmatrix}2ar & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_{j-1}^k.$$

形式上它是一个两层格式方程组,于是,可用两层格式方程组的结论.

令 $\boldsymbol{U}_j^k=\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}$,并代入方程组得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{V}^{k+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}&=\left\{\begin{pmatrix}2ar & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}+\begin{pmatrix}-4ar & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k+\begin{pmatrix}2ar & 0\\0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}\right\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}\\&=\begin{pmatrix}-4ar+2ar(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}) & 1\\1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kjh}\end{aligned}$$

于是得到传播矩阵

$$\boldsymbol{G}(r)=\begin{bmatrix}-4ar+2ar(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}) & 1\\1 & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-8ar\sin^2\dfrac{wh}{2} & 1\\1 & 0\end{bmatrix}.$$

下面求传播矩阵的特征值. 特征方程为

$$\lambda^2+8ar\lambda\sin^2\frac{wh}{2}-1=0.$$

求解方程得:

$$\lambda_{1,2}=-4ar\sin^2\frac{wh}{2}\pm\left(1+16a^2r^2\sin^4\frac{wh}{2}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

$$\rho(\boldsymbol{G})=\max|\lambda_{1,2}|=4ar\sin^2\frac{wh}{2}+\left(1+16a^2r^2\sin^4\frac{wh}{2}\right)^{\frac{1}{2}}>1+4ar\sin^2\frac{wh}{2}>1.$$

由此，对任何网格比 r，$\rho(\boldsymbol{G})>1$，不满足 Von Neumann 条件，所以，Richardson 格式是绝对不稳定的.

2.4　常系数方程的其他差分格式

1. Crank — Nicolson 差分格式

考虑齐次微分方程在两个节点 (x_j,t_k) 和 (x_j,t_{k+1}) 的中点 $(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})$ 的取值，即

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})-a\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})=0.$$

由 Taylor 公式有

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})\approx\frac{u_i^{k+1}-u_i^k}{\tau},\tag{8}$$

对 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})$ 先在时间方向上用第 k 层节点 (x_j,t_k) 的二阶导数值 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)$ 和第 $k+1$ 层节点 (x_j,t_{k+1}) 的二阶导数值 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})$ 加权平均近似，即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})\approx\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})\right],\tag{9}$$

然后分别对 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)$ 和 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})$ 在空间方向上用二阶中心差商作近似. 即

$$\begin{aligned}&\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)\approx\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k),\\&\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})\approx\frac{1}{h^2}(u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}),\end{aligned}\tag{10}$$

由(8)，(9) 和(10) 得到如下格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}=\frac{a}{2h^2}\left[(u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k)+(u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1})\right],$$

此格式称为 Crank－Nicolson 差分格式. 它的节点结构图如图 2.15 所示：

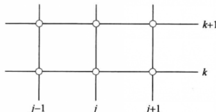


图 2.15　节点结构图

下面分析上面格式的局部截断误差.

利用 Taylor 公式有

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}=\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})+\frac{\tau^2}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\eta_k),$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+\frac{1}{2}})=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})\right]-\frac{\tau^2}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\xi_k),$$

$$u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}=h^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\theta_j,t_{k+1}),$$

$$u_{j+1}^{k}-2u_j^{k}+u_{j-1}^{k}=h^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{k+1})+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\rho_j,t_{k+1}).$$

从上述四个式子可得到局部截断误差

$$R_j^k=\left[\frac{1}{24}\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_j,\eta_k)-\frac{1}{8}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\xi_k)\right]\tau^2+\frac{a}{24}\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\rho_j,t_k)+\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\theta_j,t_{k+1})\right]h^2.$$

因此 Crank－Nicolson 差分格式的误差精度为 $O(h^2+\tau^2)$. 它从表面看起来误差精度好于最简显格式和最简隐格式的 $O(h^2+\tau)$，然而实际并非如此. 在实际中，因为有网格比 $r=\frac{\tau}{h^2}$ 是常数，说明 $O(\tau)$ 和 $O(h^2)$ 是同阶的，所以，从本质上来讲，Crank－Nicolson 差分格式的误差精度并没有提高，还是一阶的. 在后面的讨论中，我们给出一个误差精度有实质性提高的格式.

也可以从另外一个角度得出 Crank－Nicolson 差分格式. 为了方便，在此只讨论齐次方程.

假设函数 $u(x,t)$ 对时间 t 是无穷可导的，由 Taylor 级数得到

$$\begin{aligned}u(x,t+\tau)&=u(x,t)+\tau\frac{\partial u}{\partial t}(x,t)+\frac{\tau^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t)+\cdots+\frac{\tau^n}{n!}\frac{\partial^n u}{\partial t^n}(x,t)+\cdots\\&=\left[1+\tau\frac{\partial}{\partial t}+\frac{1}{2!}\left(\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)^2+\cdots+\frac{1}{n!}\left(\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)^n+\cdots\right]u(x,t)\qquad(11)\\&=\exp\left(\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)u(x,t),\end{aligned}$$

即　$u_j^{k+1}=\exp\left(\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)u_j^k,$

运用(11) 可以得到　$\exp\left(-\frac{1}{2}\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)u_j^{k+1}=\exp\left(\frac{1}{2}\tau\frac{\partial}{\partial t}\right)u_j^k,$

因为是齐次方程，得到

$$\exp\left(-\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_j^{k+1}=\exp\left(\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_j^k,\qquad(12)$$

对上式利用(11)，得到

$$\exp\left(-\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_j^{k+1}=\left[1-\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2!}\left(\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^2+\cdots\right]u_j^{k+1}$$

$$\exp\left(\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)u_j^{k}=\left[1+\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2!}\left(\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)^2+\cdots\right]u_j^{k},$$

对上面两式的右端只取前两项代入(12)，得到

$$\left[1-\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]u_j^{k+1}=\left[1+\frac{1}{2}a\tau\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]u_j^{k},$$

即 $u_j^{k+1}-u_j^k=\frac{1}{2}a\tau\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_j^{k+1}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_j^k\right)$.

分别用二阶中心差商代替上式中的二阶微商，就可以到 Crank－Nicolson 格式.

算例 4：考虑算题 1 的方程，用 Crank－Nicolson 格式求近似解，近似解曲面图和误差曲面图分别如图 2.16 和图 2.18 所示，数值结果如图 2.17 所示.

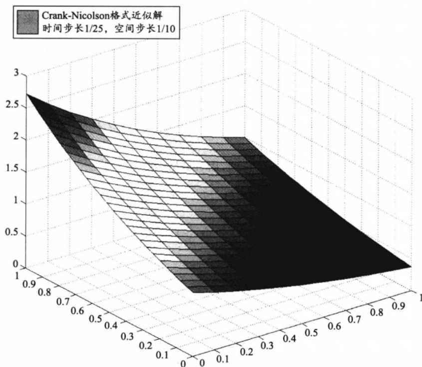


图 2.16 近似解曲面图

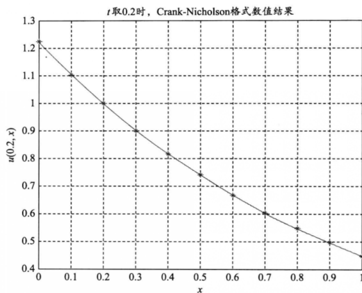


图 2.17　数值结果

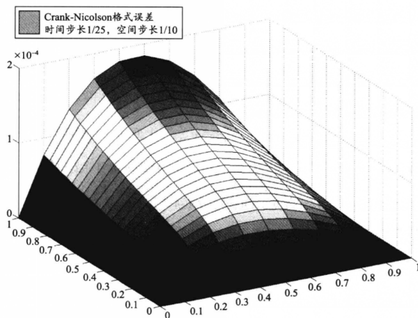


图 2.18　误差曲面图

2. 加权隐格式

将前面的显式格式写成：

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\tau} - a\frac{u_{j+1}^{k-1} - 2u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h^2} = f_j^{k-1},$$

再利用古典隐式格式：

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\tau} - a\frac{u_{j+1}^{k} - 2u_j^{k} + u_{j-1}^{k}}{h^2} = f_j^{k},$$

任取参数 $\theta \in [0,1]$，将上面两式分别乘以 $(1-\theta)$ 和 θ，然后再相加得到

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{\tau} - a\left[(1-\theta)\frac{u_{j+1}^{k-1} - 2u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h^2} + \theta\frac{u_{j+1}^{k} - 2u_j^{k} + u_{j-1}^{k}}{h^2}\right] = \theta f_j^k + (1-\theta)f_j^{k-1}.$$

此格式称为加权隐格式. 它的节点结构图如图 2.19 所示.

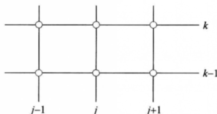


图 2.19　节点结构

利用 Taylor 公式很容易计算出局部截断误差为

$$R_j^k = \left(\frac{1}{2}-\theta\right)a\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t}(x_j,t_k)\tau - a\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j,t_k) + O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4).$$

利用齐次微分方程 $\frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，则有 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} = a\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$，上面的局部截断误差可改写为

$$\begin{aligned} R_j^k &= \left(\frac{1}{2}-\theta\right)a^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j,t_k)\tau - a\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j,t_k) + O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4) \\ &= a\left[\left(\frac{1}{2}-\theta\right)a\tau - \frac{h^2}{12}\right]\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j,t_k) + O(\tau^2) + O(\tau h^2) + O(h^4). \end{aligned} \tag{13}$$

根据上式，我们要得到更高局部截断误差精度的格式，只要令上式中的第一项为零即可. 即要 $\left(\frac{1}{2}-\theta\right)a\tau - \frac{h^2}{12} = 0$，求解可得 $\theta = \frac{1}{2} - \frac{1}{12ar}$. 于是只要取参数 $\theta = \frac{1}{2} - \frac{1}{12ar}$，即得到 $O(\tau^2 + h^4)$，此时，差分格式的精度有实质性的改进. 但是，此时对网格比有一定的要求，从参数的取值可得 $ar \geqslant \frac{1}{6}$. 当 $ar = \frac{1}{6}$ 时，$\theta = 0$，差分格式为最简显格式.

对于加权隐格式，很显然，当 $\theta = 1$ 时，加权隐格式是最简隐格式；当 $\theta = 0$ 时，是最简显格

式；当 $\theta=\frac{1}{2}$ 时，加权隐格式就是 Crank－Nicolson 格式.

利用 Fourier 分析方法分析加权隐格式的稳定性. 令 $u_j^k=v^k e^{iwjh}$，代入 Crank－Nicolson 格式，整理得到

$$\left[1+4ar\theta\sin^2\frac{wh}{2}\right]v^k=\left[1-4ar(1-\theta)\sin^2\frac{wh}{2}\right]v^{k-1}.$$

则传播因子为

$$G(r)=\frac{1-4ar(1-\theta)\sin^2\frac{wh}{2}}{1+4ar\theta\sin^2\frac{wh}{2}}.$$

令
$$|G(r)|=\left|\frac{1-4ar(1-\theta)\sin^2\frac{wh}{2}}{1+4ar\theta\sin^2\frac{wh}{2}}\right|\leqslant 1,$$

即
$$-1-4ar\theta\sin^2\frac{wh}{2}\leqslant 1-4ar(1-\theta)\sin^2\frac{wh}{2}\leqslant 1+4ar\theta\sin^2\frac{wh}{2},$$

对于任意的 w，右边不等式恒成立. 左边不等式等价于

$$4ar(1-2\theta)\sin^2\frac{wh}{2}\leqslant 2, \tag{14}$$

只要 $2ar(1-2\theta)\leqslant 1$，就有 $G(r)\leqslant 1$ 成立.

因此，当 $0\leqslant\theta\leqslant\frac{1}{2}$ 时，稳定性条件是 $ar\leqslant\frac{1}{1-2\theta}$，当 $\frac{1}{2}\leqslant\theta\leqslant 1$ 时，对于任何的网格比，等式(14) 恒成立，即为无条件稳定的. 因此，Crank－Nicolson 格式是无条件稳定的.

算例 5：考虑算例 1 的方程，用加权隐格式求近似解，计算结果如图 2.20 ～ 图 2.22 所示.

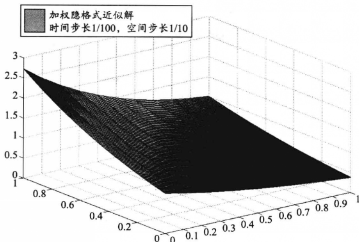


图 2.20　近似解曲面图

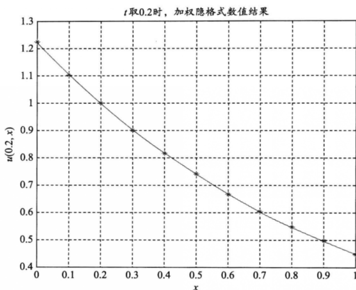


图 2.21　数值结果

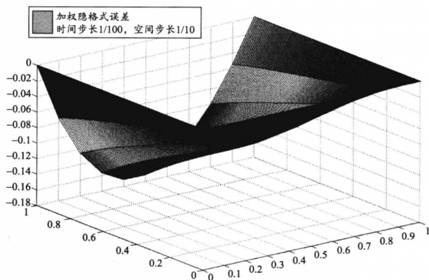


图 2.22　误差曲面图

3. 三层显式格式

在前面的章节讨论了不稳定的三层显格式 ——Richardson 格式. 因为它的不稳定，在实际应用中没有价值. 下面给出一个对 Richardson 格式做一些改进的三层显格式. 它是 1953 年由 Du－Fort 和 Frankel 提出来的. 具体格式如下

$$\frac{1}{2\tau}(u_j^{k+1}-u_j^{k-1})=\frac{a}{h^2}[u_{j+1}^k-(u_j^{k+1}+u_j^{k-1})+u_{j-1}^k]+f_j^k,1\leqslant j\leqslant M-1,\leqslant k\leqslant N-1.$$

它的节点结构图如图 2.23 所示

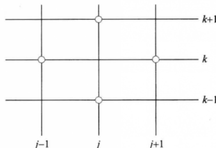


图 2.23　节点结构图

利用 Taylor 公式可以得到局部截断误差是

$$R_j^k=a\left(\frac{\tau}{h}\right)^2\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^k+O(\tau^2+h^2)+O\left(\frac{\tau^4}{h^2}\right).$$

从上面的截断误差的表达式可以看出，只有当$\frac{\tau}{h}\to 0$，也即 $\tau\to 0$ 的速度快于 $h\to 0$ 时，Du Fort －Frankel格式才相容于微分方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t)$，而且此时，差分格式的局部截断误差为 $O(\tau^2+h^2)$. 然而，当$\frac{\tau}{h}\to C\neq 0$ 时，局部截断误差 R_i^k 在网格 $\tau\to 0$ 和 $h\to 0$ 时却不趋近于零. 此时差分格式与微分方程是不相容的，差分格式相容于如下双曲方程：$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+C\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=f(x,t)$.

下面研究 Du Fort－Frankel 格式的稳定性.

因为是三层格式，首先必须化为等价方程组的二层格式. 方法完全相同于 Richardson 格式的讨论方法.

$$\begin{cases}u_j^{k+1}-u_j^{k-1}=ar[u_{j+1}^k-(u_j^{k+1}+u_j^{k-1})+u_{j-1}^k].\\ u_j^k=u_j^k,\end{cases}$$

令 $\boldsymbol{U}_j^{k+1}=(u_j^{k+1},u_j^k)^{\mathrm{T}}$，矩阵形式为

$$\begin{pmatrix}1+2ar & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_j^{k+1}=\begin{pmatrix}2ar & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_{j+1}^k+\begin{pmatrix}0 & 1-2ar\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_j^k+\begin{pmatrix}2ar & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_{j-1}^k,$$

令 $\boldsymbol{U}_j^k=\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}$，并代入方程组得到

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}1+2ar & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{k+1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}&=\left\{\begin{pmatrix}2ar & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}+\begin{pmatrix}0 & 1-2ar\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k+\begin{pmatrix}2ar & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}\right\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}\\ &=\begin{pmatrix}2ar(e^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}) & 1-2ar\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kjh},\end{aligned}$$

即有

$$\begin{pmatrix}1+2ar & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^{k+1}=\begin{pmatrix}2ar(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}) & 1-2ar\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}^k,$$

则传播矩阵为

$$\begin{aligned}G(r)&=\begin{pmatrix}1+2ar & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}2ar(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh}) & 1-2ar\\ 1 & 0\end{pmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\dfrac{4ar\cos wh}{1+2ar} & \dfrac{1-2ar}{1+2ar}\\ 1 & 0\end{bmatrix},\end{aligned}$$

传播矩阵的特征方程为

$$\lambda^2-\left(\frac{4ar}{1+2ar}\cos wh\right)\lambda-\frac{1-2ar}{1+2ar}=0,$$

求解得，方程的特征根为

$$\lambda_{1,2}=\frac{2ar\cos wh\pm\sqrt{1-4a^2r^2\sin^2 wh}}{1+2ar}.$$

如果方程有重根，则 $\lambda_{1,2}=\dfrac{2ar\cos wh}{1+2ar}<1$，所以，Du Fort－Frankel 格式是稳定的. 如果方程无重根，利用下面的定理，可以得到 $|\lambda_{1,2}|\leqslant 1$. 由此可得，Du Fort－Frankel 格式是稳定的. 综合上述，Du Fort－Frankel 格式是绝对稳定的.

定理：实系数二次方程 $\lambda^2-b\lambda-c=0$ 的根 $|\lambda_{1,2}|\leqslant 1$ 的充要条件是 $|b|\leqslant 1-c$ 且 $|c|\leqslant 1$.

证明：必要性，$|\lambda_1|\leqslant 1$，$|\lambda_2|\leqslant 1$，利用韦达定理 $\lambda_1\lambda_2=-c$，$\lambda_1+\lambda_2=b$，有

$$|c|=|\lambda_1\lambda_2|=|\lambda_1||\lambda_2|\leqslant 1,\tag{15}$$

$$1-c-|b|=1+\lambda_1\lambda_2-|\lambda_1+\lambda_2|=1+\lambda_1\lambda_2\pm(\lambda_1+\lambda_2)=(1\pm\lambda_1)(1\pm\lambda_2)\geqslant 0,$$

上式乘积中的符号是取相同的，即同正或者同负；因此有 $|b|\leqslant 1-c$.

充分性：因为 $|b|\leqslant 1-c$，即 $1-c-|b|\geqslant 0$，又因为

$$1-c-|b|=(1\pm\lambda_1)(1\pm\lambda_2),$$

所以有 $(1\pm\lambda_1)(1\pm\lambda_2)\geqslant 0$，即有

$$(1-\lambda_1)(1-\lambda_2)\geqslant 0\ \text{或者}\ (1+\lambda_1)(1+\lambda_2)\geqslant 0.\tag{16}$$

又因为

$$|c| = |\lambda_1\lambda_2| = |\lambda_1||\lambda_2| \leqslant 1,$$

由(15) 和(16) 可得到 $|\lambda_{1,2}| \leqslant 1$.

下面验证 Du Fort－Frankel 格式的传播矩阵的特征方程的系数满足引理的条件.

很显然　$c = \dfrac{1-2ar}{1+2ar} \leqslant 1$,

$$1 - c = \frac{4ar}{1+2ar} \geqslant \frac{4ar}{1+2ar}|\cos wh| = \left|\frac{4ar}{1+2ar}\cos wh\right| = |b|.$$

因此满足引理的条件,则有 $|\lambda_{1,2}| \leqslant 1$,所以 Du Fort－Frankel 格式是无条件稳定的.

从上面的讨论可以看出,Du Fort－Frankel格式是从不稳定的 Richardson 格式出发,通过修正得到三层显式格式,此格式是无条件稳定的. 但是,它的相容性是有条件的,它的相容性必须满足我们前面所提到的条件. 客观上,我们无法构造出无条件相容和无条件稳定的显式差分格式.

算例 6:考虑算例 1 的方程,用 DFF 格式计算近似解,计算结果如图 2.24 ～ 图 2.26 所示.

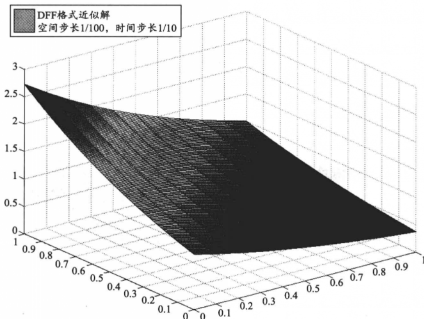


图 2.24　近似解曲面图

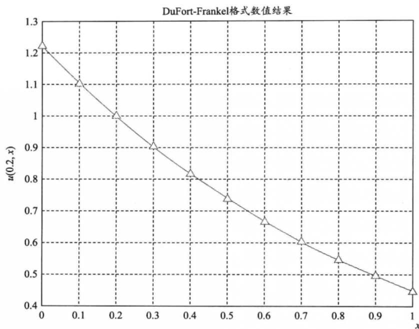


图 2.25　数值结果

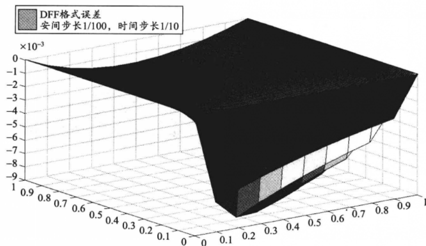


图 2.26　误差曲面图

4. 三层隐式格式

$$\frac{3}{2\tau}(u_j^{k+1}-u_j^k)-\frac{1}{2\tau}(u_j^k-u_j^{k-1})=\frac{a}{h^2}[u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}],$$

$$1\leqslant j\leqslant M-1, 1\leqslant k\leqslant N-1,$$

或者

$$(3+4ar)u_j^{k+1}-2ar(u_{j+1}^{k+1}+u_{j-1}^{k+1})=4u_j^k-u_j^{k-1},$$

它的节点结构图如图 2.27 所示.

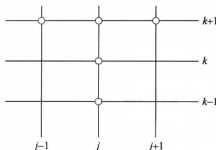


图 2.27　节点结构图

利用 Taylor 公式,可以得到其局部截断误差为 $R_i^k=O(\tau^2+h^2)$.

类似于 Du Fort－Frankel 方法,利用 Fourier 分析方法,得到传播矩阵

$$\boldsymbol{G}(r)=\begin{pmatrix}\dfrac{4}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}} & \dfrac{-1}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

传播矩阵的特征方程为

$$\lambda^2-\frac{4}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}\lambda+\frac{1}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}=0,$$

求解得,方程的特征根为

$$\lambda_{1,2}=\frac{2\pm\sqrt{1-8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}.$$

如果方程有重根,则 $\lambda_{1,2}=\dfrac{2\pm\sqrt{1-8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}}{3+8ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}=\dfrac{2}{4}\leqslant 1$,如果方程无重根,利用上面的引

理可以得到 $|\lambda_{1,2}| \leqslant 1$. 由此可得,三层隐格式是稳定的,综合上述,三层隐格式是绝对稳定的.

算例 7:考虑算例 1 方程,用三层隐式格式计算近似解,计算结果如图 2.28、图 2.29 和图 2.30.

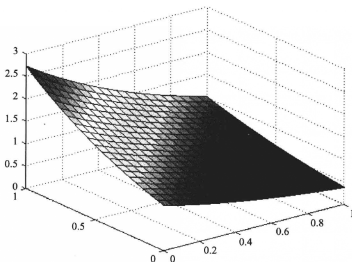


图 2.28　近似解曲面图

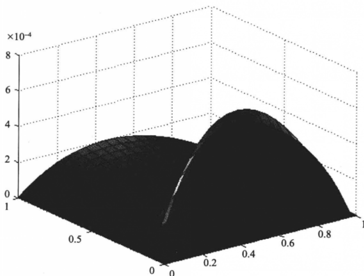


图 2.29　误差曲面图

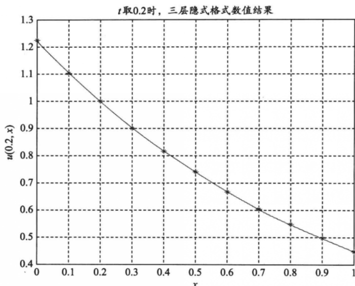


图 2.30　数值结果

下面讨论另外一个三层隐格式.

记 $\delta_x^2 u_j^k = u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k$，引入如下格式

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^{k-1}}{2\tau} - \frac{a}{3h^2}(\delta_x^2 u_j^{k+1} + \delta_x^2 u_j^k + \delta_x^2 u_j^{k-1}) = 0,$$

此格式可以理解为是 Richardson 格式的推广，即用三层的二阶中心差商的平均值 $\frac{1}{3}(\delta_x^2 u_j^{k+1} + \delta_x^2 u_j^k + \delta_x^2 u_j^{k-1})$ 替代了 $\delta_x^2 u_j^k$. 也可以理解为是两层的 Crank－Nicolson 格式向三层的推广. 其局部截断误差也为 $R_j^k = O(\tau^2 + h^2)$. 节点图如图 2.31 所示.

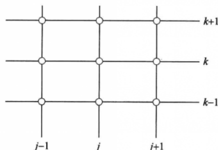


图 2.31　节点结构图

下面讨论差分格式的稳定性.首先转化为方程组的形式

$$\begin{cases}(1-\frac{2}{3}ar\delta_x^2)u_j^{k+1}=\frac{2}{3}ar\delta_x^2u_j^k+(1+\frac{2}{3}ar\delta_x^2)v_j^k,\\ u_j^k=u_j^k,\end{cases}$$

记 $\boldsymbol{U}_j^{k+1}=(u_j^{k+1},u_j^k)$,则其矩阵形式

$$\begin{pmatrix}1-\frac{2}{3}ar\delta_x^2 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_j^{k+1}=\begin{pmatrix}\frac{2}{3}ar\delta_x^2 & (1+\frac{2}{3}ar\delta_x^2)\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{U}_j^k$$

令 $\boldsymbol{U}_j^{k+1}=\boldsymbol{V}^{k+1}e^{iwjh}$,代入上式并整理得到

$$\begin{pmatrix}1+\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2} & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\boldsymbol{V}_j^{k+1}=\begin{pmatrix}-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2} & 1-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2}\\ 1 & 0\end{pmatrix}\boldsymbol{V}_j^k$$

则传播矩阵为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}(r,w)&=\begin{pmatrix}1+\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2} & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2} & 1-\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2}\\ 1 & 0\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\frac{-\alpha}{1+\alpha} & \frac{1-\alpha}{1+\alpha}\\ 1 & 0\end{pmatrix}\qquad \alpha=\frac{8}{3}ar\sin^2\frac{wh}{2}\end{aligned}$$

其特征方程为$\lambda^2+\frac{\alpha}{1+\alpha}\lambda-\frac{1-\alpha}{1+\alpha}=0$.

因为系数满足引理的条件,所以$|\lambda_{1,2}|\leqslant 1$,且 $\lambda_{1,2}=\frac{-\alpha\pm\sqrt{4-3\alpha^2}}{2(1+\alpha)}$.当特征方程有重根时,$|\lambda|=\frac{\frac{2}{\sqrt{3}}}{2(1+\frac{2}{\sqrt{3}})}=\frac{1}{2+\sqrt{3}}<1$,因此,此时,格式也是稳定的.综合上述,三层隐格式是绝对稳定的.

算例 8:以算例 1 为例,用第二种三层隐式格式求近似解,近似解的曲面图和误差曲面图,如图 2.32 ~ 图 2.34 所示.

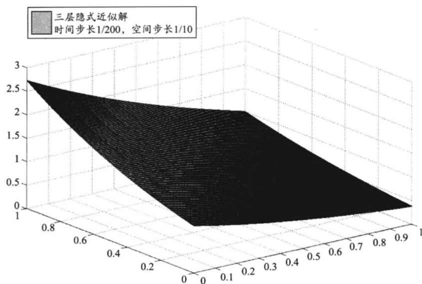


图 2.32　近似解曲面图

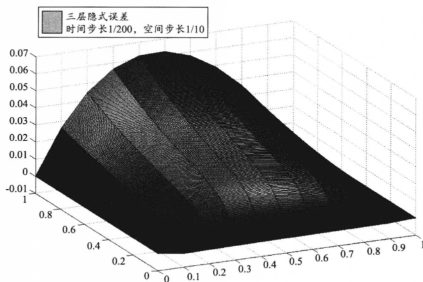


图 2.33　误差曲面图

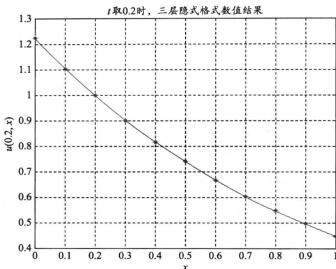


图 2.34　数值结果

5. 交替显隐格式

1) 预测 — 校正格式

此格式是分两步计算的,先在 $k+\frac{1}{2}$ 层,用最简显格式计算出 $u_j^{k+\frac{1}{2}}$ 作为过渡值,然后在 $k+1$ 层上,用最简隐格式计算 u_j^{k+1}. 具体格式如下

$$\begin{cases} \dfrac{u_j^{k+\frac{1}{2}}-u_j^k}{\frac{\tau}{2}}-a\dfrac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0, \\ \dfrac{u_j^{k+1}-u_j^{k+\frac{1}{2}}}{\frac{\tau}{2}}-a\dfrac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0, \end{cases}$$

如果把第一式中的 $u_j^{k+\frac{1}{2}}$ 求解出来,代入第二式后得到 Crank — Nicolson 格式,即

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-\frac{a}{2}\left(\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}+\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}\right)=0,$$

所以它的局部截断误差是 $R_i^k=O(\tau^2+h^2)$,下面讨论格式的稳定性,因为第一式是最简显格式,所以传播因子 $G(r)=1-2ar\sin^2\frac{wh}{2}$. 第二式是最简隐格式,所以传播因子为 $G(r)=\dfrac{1}{1+2ar\sin^2\frac{wh}{2}}$,两式叠加后得到预测 —— 校正格式的传播因子:

$$G(r)=\frac{1-2ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}{1+2ar\sin^2\dfrac{wh}{2}}.$$

传播因子等于 Crank－Nicolson 格式的传播因子，很显然是绝对稳定的.

算例 9：以算例 1 为例，用预测校正格式计算近似解，计算结果如图 2.35 和图 2.36 所示.

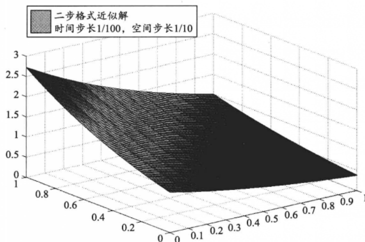


图 2.35　近似解曲面图

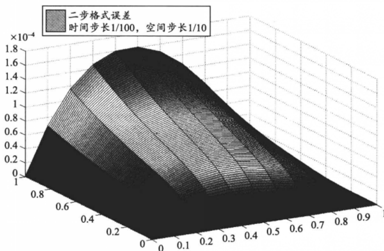


图 2.36　误差曲面图

2）跳点格式

首先将网格点(x_i,t_k)分成两组，将$k+j$为奇数的分成一组，称为奇数节点；将$k+j$为偶数的分成另外一组，称为偶数节点. 从第k层到第$k+1$的计算过程中，先在偶数节点用最简显格式计算，然后再在奇数节点用最简隐格式计算. 即

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}=0,\quad k+j+1=\text{偶数};$$

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,\quad k+j+1=\text{奇数}.$$

在实际计算中，不采用上面的格式，还有比较简单的规则可寻. 假设第$k+1$层的节点全部计算出来后，计算第$k+2$层的节点值. 当$k+j+2=$偶数时，则$k+j+1=$奇数.

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^{k+1}}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,\quad k+j+2=\text{偶数};$$

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,\quad k+j+1=\text{奇数};$$

上面两式相减得到

$$u_j^{k+2}=2u_j^{k+1}-u_j^k,\quad k+j+2=\text{偶数};\tag{17}$$

当$k+j+2=$奇数时，$\frac{u_j^{k+2}-u_j^{k+1}}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^{k+2}-u_j^{k+2}+u_{j-1}^{k+2}}{h^2}=0$，

即
$$u_j^{k+2}-u_j^{k+1}-ar(u_{j+1}^{k+2}-u_j^{k+2}+u_{j-1}^{k+2})=0.\tag{18}$$

跳点格式的计算过程是：第$k+1$层的节点全部计算出来后，首先计算第$k+2$层的偶数节点的值，用(17)计算，这样第$k+2$层的偶数节点全部计算出来，只剩下第$k+2$层的奇数节点. 然后计算第$k+2$层的奇数节点值，用(18)计算. 然而此时u_j^{k+1}，u_{j+1}^{k+2}和u_{j-1}^{k+2}已经全部知道，这样奇数节点的计算实际上也是显式格式计算. 为什么会这样呢?因为，只要将$u_j^{k+2}+u_j^k=2u_j^{k+1}$代入(18)，得到

$$\frac{u_j^{k+2}-u_j^k}{2\tau}-a\frac{u_{j+1}^{k+1}-(u_j^{k+2}+u_j^k)+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}=0,$$

这是Du Fort－Frankel格式. 也是在第$k+2$层的偶数节点和$k+1$层的奇数节点的计算式，所以局部截断误差是二阶精度的；于是，跳点格式与Du Fort－Frankel格式局部截断误差是相同的，稳定性也相同. 但计算方法有很大的改进. 计算方便，需要的内存少.

算例10：以例1为例，应用跳点格式计算方程的近似解，计算结果如图2.37和图2.38所示.

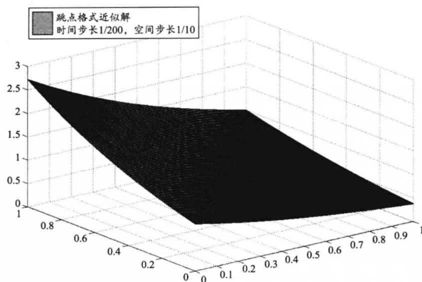


图 2.37　近似解曲面图

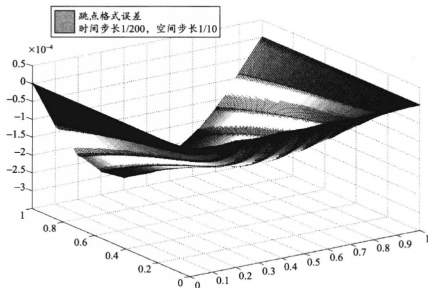


图 2.38　误差曲面图

6. 紧格式

考虑一维非齐次热传导的定解问题

$$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t),\quad 0<x<1,\quad T\geqslant t>0,$$
$$u(x,0)=\varphi(x),\quad 0<x<1,$$
$$u(0,t)=\varphi_1(t),\quad u(0,t)=\varphi_2(t),\quad 0<t\leqslant T.$$

令 $v=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，则有 $v=\frac{1}{a}[\frac{\partial u}{\partial t}-f(x,t)]$. 定义网格函数

$$U_i^k=u(x_i,t_k),V_i^k=v(x_i,t_k),$$

利用 Taylor 公式

$$\begin{aligned}\delta_x^2U_i^k&=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i,t_k)+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_i,t_k)+\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k)\\&=v(x_i,t_k)+\frac{h^2}{12}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x_i,t_k)+\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k)\\&=V_i^k+\frac{h^2}{12}[\delta_x^2V_i^k-\frac{h^2}{12}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(\eta_i,t_k)]+\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k)\\&=\frac{1}{12}(V_{i-1}^k+10V_i^k+V_{i+1}^k)+[\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k)-\frac{h^4}{144}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(\eta_i,t_k)],\end{aligned}$$

其中 $\xi_i,\eta_i\in[x_{i-1},x_{i+1}]$.

将上式的上脚标 k 改为 $k+1$. 然后将 k 和 $k+1$ 的两个等式相加再平均可得

$$\frac{1}{2}(\delta_x^2U_i^k+\delta_x^2U_i^{k+1})=\frac{1}{12}(V_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}+10V_i^{k+\frac{1}{2}}+V_{i+1}^{k+\frac{1}{2}})+[\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k^*)-\frac{h^4}{144}\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(\eta_i,t_k^*)]+$$
$$\frac{\tau^2}{12\times 8}(\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_{i-1},\theta_k)+10\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_i,\theta_k)+\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(x_{i+1},\theta_k)),$$

由前面的定义可得

$$\begin{aligned}\delta_x^2U_i^{k+\frac{1}{2}}=&\frac{1}{12a}(\delta_tU_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}+10\delta_tU_i^{k+\frac{1}{2}}+\delta_tU_{i+1}^{k+\frac{1}{2}})-\\&\frac{1}{12a}[f(x_{i-1},t_{k+\frac{1}{2}})+10f(x_i,t_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1},t_{k+\frac{1}{2}})]-\\&\frac{\tau^2}{12\times 24a}[\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_{i-1},\theta_k^*)+10\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_i,\theta_k^*)+\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}(x_{i+1},\theta_k^*)]+\\&[\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}(\xi_i,t_k^*)-\frac{h^4}{144}\frac{\partial^6 v}{\partial t^6}(\eta_i,t_k^*)]+\end{aligned}$$

$$\frac{\tau^2}{12\times 8}\left[\frac{\partial^4 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_{i-1},\theta_k)+10\frac{\partial^4 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_i,\theta_k)+\frac{\partial^2 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_{i+1},\theta_k)\right].$$

在上式中忽略无穷小量，也即后面八项，得到格式

$$\begin{aligned}&\frac{1}{12}(\delta_t u_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}+10\delta_t u_i^{k+\frac{1}{2}}+\delta_t u_{i+1}^{k+\frac{1}{2}})-a\delta_x^2 u_i^{k+\frac{1}{2}}\\&=\frac{1}{12}[f(x_{i-1},t_{k+\frac{1}{2}})+10f(x_i,t_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{i+1},t_{k+\frac{1}{2}})],\end{aligned}$$

被忽略的是局部截断误差，记为

$$\begin{aligned}R=&+\frac{\tau^2}{12\times 8}\left(\frac{\partial^4 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_{i-1},\theta_k)+10\frac{\partial^4 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_i,\theta_k)+\frac{\partial^2 v}{\partial t^2\partial x^2}(x_{i+1},\theta_k)\right)-\\&\frac{\tau^2}{12\times 24a}\left[\frac{\partial^3 v}{\partial t^3}(x_{i-1},\theta_k^*)+10\frac{\partial^3 v}{\partial t^3}(x_i,\theta_k^*)+\frac{\partial^3 v}{\partial t^3}(x_{i+1},\theta_k^*)\right]+\\&\left[\frac{h^4}{360}\frac{\partial^6 v}{\partial x^6}(\delta_i,t_k^*)-\frac{h^4}{144}\frac{\partial^6 v}{\partial x^6}(\eta_i,t_k^*)\right],\end{aligned}$$

差分格式的具体形式为

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar\right)u_{i-1}^{k+1}+\left(\frac{5}{6}+ar\right)u_i^{k+1}+\left(\frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar\right)u_{i+1}^{k+1}\\&=\left(\frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar\right)u_{i-1}^{k}+\left(\frac{5}{6}-ar\right)u_i^{k}+\left(\frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar\right)u_{i+1}^{k}+\\&\quad\frac{\tau}{12}(f_{i-1}^{k+\frac{1}{2}}+10f_i^{k+\frac{1}{2}}+f_{i+1}^{k+\frac{1}{2}}),1\leqslant i\leqslant m-1,0\leqslant k\leqslant n-1.\end{aligned}$$

矩阵形式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^{k+1}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{U}^{k}+\boldsymbol{F},$$

其中 $$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\frac{5}{6}+ar & \frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar & & \\ \frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar & \frac{5}{6}+ar & \frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar & \frac{5}{6}+ar\end{pmatrix},$$

$$
\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}
\frac{5}{6}-ar & \frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar & & \\
\frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar & \frac{5}{6}-ar & \frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & \frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar & \frac{5}{6}-ar
\end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{F}=\begin{pmatrix}
(\frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar)u_0^k-(\frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar)u_0^{k+1}+\tau f_1^{k+\frac{1}{2}} \\
\tau f_2^{k+\frac{1}{2}} \\
\vdots \\
\tau f_{m-2}^{k+\frac{1}{2}} \\
(\frac{1}{12}+\frac{1}{2}ar)u_m^k-(\frac{1}{12}-\frac{1}{2}ar)u_m^{k+1}+\tau f_{m-1}^{k+\frac{1}{2}}
\end{pmatrix}.
$$

算例 11:用紧格式计算以算例 1 为例的近似解.计算结果如图 2.39 和图 2.40 所示.

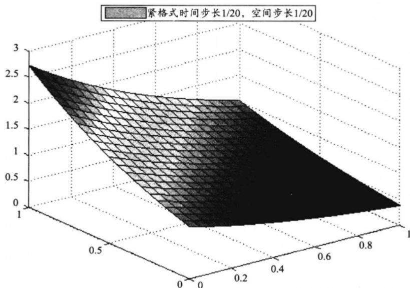


图 2.39　近似解曲面图

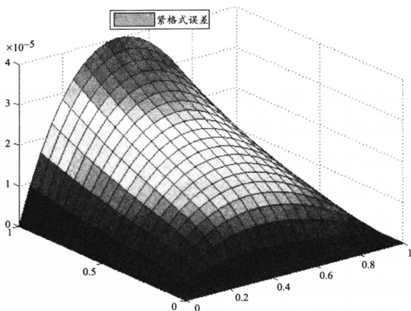


图 2.40　误差曲面图

2.5　Richardson 外推法

本节介绍一种通过数学技巧来提高计算精度的方法 ——Richardson 外推法，它的思想是将一些计算精度比较粗糙的近似解进行适当的组合，在增加适当的计算量的情况下，使计算精度有本质性的提高.

设未知量 p 的一个近似解是关于网格步长 h 的函数 $p_0(h)$，当 $h \to 0$ 时，其误差的阶是 $O(h^2)$，并且 p 与 $p_0(h)$ 之间的关系可以表示为

$$p = p_0(h) + \alpha h^2 + O(h^4),$$

其中 α 与 h 无关.

在上式中用更细的网格步长 $\frac{h}{2}$ 代替现有步长 h，得到

$$p = p_0(h/2) + \alpha h^2/4 + O((h/2)^4).$$

从上面两式消除 h^2 项得到

$$p = \frac{4}{3}p_0(\frac{h}{2}) - \frac{1}{3}p_0(h) + O(h^4),$$

记 $p_1(h)=\frac{4}{3}p_0(\frac{h}{2})-\frac{1}{3}p_0(h)$，很显然，可以将 $p_1(h)$ 作为 p 的另外一个近似量，而且其误差精度达到 $O(h^4)$. 称此方法是 Richardson 外推法.

算例 12：针对 Crank－Nicolson 格式的近似解作外推，如图 2.41 和图 2.42 所示.

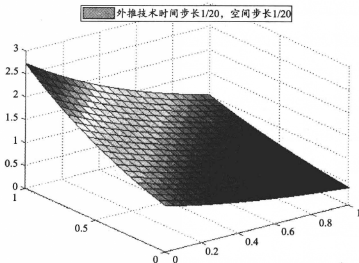


图 2.41　近似解曲面图

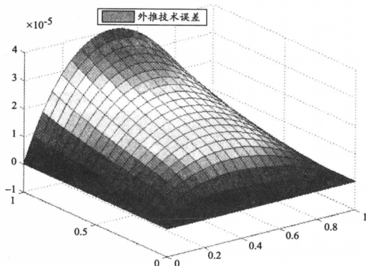


图 2.42　外推技术误差曲面图

2.6　变系数抛物型方程的差分格式

考虑变系数抛物方程的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}-a(x,t)\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t), \quad a(x)\geqslant a_0>0,\\ u(x,0)=g(x).\end{cases} \tag{19}$$

前面章节所讨论的常系数方程的差分格式基本都可以推广到变系数方程上，例如下面讨论的利用 Taylor 公式展开方法得到的显格式等.

1. 显式格式

定义 Ω_h 上的网格函数

$$U=\{u_j^k \mid 0\leqslant j\leqslant M, 0\leqslant k\leqslant N\},$$

其中 $u_j^k=u(x_j,t_k), 0\leqslant j\leqslant M, 0\leqslant k\leqslant N$.

考虑微分方程(19) 在节点(x_j,t_k) 的取值，有

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)-a(x_j,t_k)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)=f(x_j,t_k), 1\leqslant j\leqslant M-1, 1\leqslant k\leqslant N-1, \tag{20}$$

因为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_k)=\frac{u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)}{h^2}+O(h^2),$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j,t_k)=\frac{1}{\tau}[u(x_j,t_{k+1})-u(x_j,t_k)]+O(\tau),$$

于是带入(20)，并且忽略高阶无穷小量，得到

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}=a_j^k\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{h^2}+f_j^k, 1\leqslant j\leqslant M-1, 1\leqslant k\leqslant N-1.$$

这是变系数的最简显格式. 其局部截断误差为 $R_j^k=O(\tau+h^2)$.

2. 紧格式

假设 $a(x_i,t_k)$ 有充分的光滑性. 记 $\delta_x^2 u_j^n=u(x_{j+1},t_k)-2u(x_j,t_k)+u(x_{j-1},t_k)$,

$$\frac{\delta_x^2 u_j^k}{h^2}=\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^k+\frac{h^2}{12}\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right]_j^k+O(h^4)=(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})_j^k+\frac{h^2}{12}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t}))_j^k+O(h^4)$$

$$= (\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})_j^k + \frac{h^2}{12}\left\{\frac{\delta_x^2(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})}{h^2}\Big|_j^k + O(h^2)\right\} + O(h^4)$$

$$= \frac{5}{6}(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})_j^k + \frac{1}{12}(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})_{j+1}^k + \frac{1}{12}(\frac{1}{a(x,t)}\frac{\partial u}{\partial t})_{j-1}^k + O(h^4).$$

然后引入时间的差商得到格式

$$\frac{1}{12}\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j+1}^k}{a_{j+1}^{k+\frac{1}{2}}\cdot\tau} + \frac{5}{6}\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{a_j^{k+\frac{1}{2}}\cdot\tau} + \frac{1}{12}\frac{u_{j-1}^{k+1}-u_{j-1}^k}{a_{j-1}^{k+\frac{1}{2}}\cdot\tau} = \frac{\delta_x^2 u_j^{k+1} + \delta_x^2 u_j^k}{2h^2}.$$

它的局部截断误差是 $R_j^k = O(\tau^2 + h^4)$.

3. Keller 盒式格式

考虑初边值问题

$$\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(a(x)\frac{\partial u}{\partial x}), & a(x) \geqslant a_0 > 0, \\ u(x,0) = g(x), & 0 < x < 1, \\ u(0,t) = g_0(x), & t > 0, \\ u(1,t) = g_1(x). & t > 0.\end{cases}$$

将二阶方程化为等价的方程组为

$$\begin{cases}a(x)\frac{\partial u}{\partial x} = v(x,t), & (x,t) \in \{(x,t) \mid 0 \leqslant x \leqslant 1, 0 \leqslant t \leqslant T\}, \\ \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t},\end{cases}$$

引入均值记号,如 $x_{j\pm\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_j + x_{j\pm1})$,其他情况类似这样的记法. 考虑对上面的一阶方程组第一个方程在节点 $(x_{j-\frac{1}{2}}, t_k)$ 取值,第二个方程在节点 $(x_{j-\frac{1}{2}}, t_{k-\frac{1}{2}})$ 取值,然后分别使用一阶中心差商,得到

$$\begin{cases}a_{j-\frac{1}{2}}\frac{u_j^k - u_{j-1}^k}{h} = v_{j-\frac{1}{2}}^k, \\ \frac{v_j^{k-\frac{1}{2}} - v_{j-1}^{k-\frac{1}{2}}}{h} = \frac{u_{j-\frac{1}{2}}^k - u_{j-\frac{1}{2}}^{k-1}}{\tau},\end{cases} \quad j = 1,2,\cdots,M-1, k = 1,2,\cdots,N-1.$$

对 $v(x,t)$ 的初始条件的离散

$$\begin{cases}u_j^0 = g(x_j), \\ v_j^0 = a_j\frac{dg(x_j)}{dx},\end{cases} \quad j = 1,2,\cdots,M.$$

4. 积分插值方法

考虑变系数抛物方程的初值问题

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t}-a(x,t)\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t), \quad a(x)\geqslant a_0>0,\\ u(x,0)=g(x),\end{cases}$$

引入变量 $w(x,t)=a(x,t)\dfrac{\partial u}{\partial x}$,则方程化为$\dfrac{\partial u}{\partial t}=\dfrac{\partial w}{\partial x}$. (21)

对方程(21)两边在矩形区域 $e=[x_{j-\frac{1}{2}},x_{j+\frac{1}{2}}]\times[t_k,t_{k+1}]$ 进行积分,有

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}[u(x,t_{k+1})-u(x,t_k)]\mathrm{d}x=\int_{t_k}^{t_{k+1}}[w(x_{j+\frac{1}{2}},t)-w(x_{j-\frac{1}{2}},t)]\mathrm{d}t+\iint_e f\mathrm{d}x\mathrm{d}t, \tag{22}$$

因为

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}}w(x,t)\mathrm{d}x=\int_{x_j}^{x_{j+1}}a(x,t)\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x\approx\frac{\partial u}{\partial x}(x_{x_{j+\frac{1}{2}}},t)\int_{x_j}^{x_{j+1}}a(x,t)\mathrm{d}x=\frac{\partial u}{\partial x}(x_{x_{j+\frac{1}{2}}},t)hA_j,$$

其中$\int_{x_j}^{x_{j+1}}a(x,t)\mathrm{d}x=A_jh$.

利用矩形积分公式

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}}w(x,t)\mathrm{d}x\approx w(x_{j+\frac{1}{2}},t_k)h,$$

利用中心差商代替导数,于是

$$w(x_{j+\frac{1}{2}},t_k)\approx A_j\frac{u(x_{j+1},t)-u(x_j,t)}{h},$$

$$\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}}u(x,t_k)\mathrm{d}x\approx hu(x_j,t_k),$$

$$\int_{t_k}^{t_{k+1}}w(x_{j+\frac{1}{2}},t)\mathrm{d}t\approx\tau[\theta w(x_{j+\frac{1}{2}},t_{k+1})+(1-\theta)w(x_{j+\frac{1}{2}},t_k)].$$

把上述三式代入(22)得到格式如下

$$\frac{u(x_j,t_k)-u(x_j,t_{k-1})}{\tau}=\frac{1}{h^2}[\theta\,\delta_-(A_j\delta_+u(x_j,t_{k+1}))+(1-\theta)\,\delta_-(A_j\delta_+u(x_{j-1},t_k))].$$

其中 δ_+、δ_- 分别表示向前、向后差分. 此格式类似于常系数方程的加权隐格式.

2.7 初边值问题的边界离散

1. 第一初边值问题

考虑下面的问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - a\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, & 0 < x < 1 \quad t > 0, \\ u(x,0) = f(x), & 0 < x < 1, \\ u(0,t) = \varphi(t), & t \geqslant 0, \\ u(1,t) = \psi(t), & t \geqslant 0, \end{cases}$$

初值的离散 $u_j^0 = f_j,\quad 0 \leqslant j \leqslant M,$

边值的离散 $\begin{cases} u_0^k = \varphi(t_k), & k \geqslant 0, \\ u_j^k = \psi(t_k), & k \geqslant 0. \end{cases}$

2. 第二类或者第三类初边值问题

考虑下面的方程

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - a\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, & 0 < x < 1 \quad t > 0, \\ u(x,0) = f(x), & 0 < x < 1, \\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \alpha u(0,t) + \mu(t), & t > 0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial x}(1,t) = \beta u(1,t) + \gamma(t), & t > 0. \end{cases}$$

初值离散 $u_j^0 = f_j,\quad 0 \leqslant j \leqslant M.$

$\dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t)$ 可以用向前差商做近似，$\dfrac{\partial u}{\partial x}(1,t)$ 可以用向后差商做近似，于是得到边界的离散格式：

$$\begin{cases} \dfrac{u_1^k - u_0^k}{h} = \alpha u_0^k + \mu(t_k), \\ \dfrac{u_M^k - u_{M-1}^k}{h} = \beta u_M^k + \gamma(t_k). \end{cases}$$

从前面的讨论可知，对于抛物方程的离散差分格式，内部节点在空间上的局部截断误差精度都是二阶. 然而，上面给出边界的离散格式的局部截断误差的精度却是一阶的. 很显然，内部节点的精度与边界节点的精度不匹配，于是整个离散差分格式的精度是一阶的. 于是，为了使

边界节点的精度也达到二阶，可以使用下面的方法. 在网格上添加两组辅助节点作为虚拟网络，即 u_{-1}^k 和 u_{M+1}^k. 于是在边界节点上的一阶偏导数可以构造一阶中心差分格式，即

$$\begin{cases} \dfrac{u_1^k - u_{-1}^k}{2h} = \alpha u_0^k + \mu(t_k), \\ \dfrac{u_{M+1}^k - u_{M-1}^k}{2h} = \beta u_0^k + \gamma(t_k). \end{cases} \tag{23}$$

由于增加了两组节点，未知数的个数增大. 但是由内部节点所得到的方程个数加上边界节点所得到的方程个数之和少于未知数的个数，方程组是未定方程组. 我们必须增加方程的个数，处理方法是，因为增加了两组辅助节点，于是原来的边界节点成了内部节点，假设它们也满足微分方程，对它们采用和原始内部节点相同的处理方法进行离散. 比如，最简显格式

$$\frac{u_0^{k+1} - u_0^k}{\tau} - a\,\frac{u_1^k - 2u_0^k + u_{-1}^k}{h^2} = f_0^k,$$

$$\frac{u_M^{k+1} - u_M^k}{\tau} - a\,\frac{u_{M+1}^k - 2u_M^k + u_{M-1}^k}{h^2} = f_M^k,$$

化简为

$$\begin{cases} u_0^{k+1} = u_0^k + ar(u_1^k - 2u_0^k + u_{-1}^k), \\ u_M^{k+1} = u_M^k + ar(u_{M+1}^k - 2u_M^k + u_{M-1}^k), \end{cases} \tag{24}$$

联立(23) 和(24)，消去 u_{-1}^k 和 u_{M+1}^k 得到

$$\begin{cases} u_0^{k+1} = [1 - 2ar(1 + ah)]u_0^k + 2aru_1^k - 2arh\mu_k, \\ u_M^{k+1} = [1 - 2ar(1 - \beta h)]u_M^k + 2aru_{M-1}^k + 2arh\gamma_k. \end{cases}$$

由此得到，边界节点的值可以通过内部节点的值表示出来，而且其误差精度是二阶的. 和内部节点所得到的方程一起联立求解.

2.8　高维抛物型方程

1. 一般古典格式

考虑齐次抛物方程的初边值问题

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = a\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right), \quad 0 < x, y < 1, a > 0, \\ u(x,y,0) = f(x,y), \quad t > 0, \\ u(0,y,t) = u(1,y,t) = u(x,0,t) = u(x,1,t) = 0. \end{cases} \tag{25}$$

网格的剖分和一维类似，为了简单起见，都采用等步长剖分，而且在 x, y 方向的步长相同，即 $\Delta x = \Delta y = h$. 时间步长 $\Delta t = \tau$. 得到网格

$$\Omega_h = \left\{ (x_j, y_l, t_n) \middle| \begin{array}{l} x_j = jh, j = 0,1,\cdots,M, Mh = 1 \\ y_l = lh, l = 0,1,\cdots,M, Mh = 1 \\ t_k = k\tau \quad k = 0, \cdots, N \end{array} \right\}.$$

定义 Ω_h 上的网格函数

$$U = \{u_{j,l}^k \mid 0 \leqslant j \leqslant M, 0 \leqslant l \leqslant M, 0 \leqslant k \leqslant N\},$$

其中 $u_{j,l}^k = u(x_j, y_l, t_k), 0 \leqslant j \leqslant M, 0 \leqslant l \leqslant M, 0 \leqslant k \leqslant N.$

为了书写方便,引入记号

$$\delta_x^2 u_{j,l}^k = u_{j+1,l}^k - 2u_{j,l}^k + u_{j,l}^k, \delta_y^2 u_{j,l}^k = u_{j,l}^k - 2u_{j,l}^k + u_{j,l-1}^k.$$

二维常系数方程,类似于一维的相应情形,采用前面的直接差商法,可以得到相应的高维各种差分格式,也可以用 Fourier 分析方法得到稳定性. 比如

最简显格式

$$\frac{u_{jl}^{k+1} - u_{jl}^k}{\tau} = a\,\frac{1}{h^2}(\delta_x^2 u_{jl}^k + \delta_y^2 u_{jl}^k),$$

其局部截断误差是 $O(\tau + h^2)$,传播因子是 $G(r) = 1 - 4ar(\sin^2 \frac{w_1 h}{2} + \sin^2 \frac{w_2 h}{2})$,于是得到稳定条件是 $ar \leqslant \frac{1}{4}$,一般 n 维方程的稳定条件是 $ar \leqslant \frac{1}{2n}$.

最简隐格式

$$\frac{u_{jl}^k - u_{jl}^{k-1}}{\tau} = \frac{a}{h^2}(\delta_x^2 u_{jl}^k + \delta_y^2 u_{jl}^k),$$

其局部截断误差是 $O(\tau + h^2)$,传播因子是 $G(r) = \dfrac{1}{1 + 4ar(\sin^2 \frac{w_1 h}{2} + \sin^2 \frac{w_2 h}{2})}$ 是绝对稳定的.

2. Crank — Nicolson 格式

$$\frac{u_{jl}^{k+1} - u_{jl}^k}{\tau} = \frac{a}{2h^2}[\delta_x^2(u_{jl}^{k+1} + u_{jl}^k) + \delta_y^2(u_{jl}^{k+1} + u_{jl}^k)],$$

其局部截断误差是 $O(\tau^2 + h^2)$,传播因子是 $G(r) = \dfrac{1 - 2ar\sin^2 \frac{w_1 h}{2} - 2ar\sin^2 \frac{w_2 h}{2}}{1 + 2ar\sin^2 \frac{w_1 h}{2} + 2ar\sin^2 \frac{w_2 h}{2}}$,也是绝对稳定的格式.

3. 交替显隐格式

尽管一维的很多格式可以直接推广到高维的情况,但是,高维问题还具有自己的特殊性. 例

如，二维显格式，计算很简单，但是和一维相比，它的稳定性条件变得苛刻了，即 $ar \leqslant \frac{1}{4}$. 要获得稳定性，网格的节点数要增加 4 倍，其计算量也只增加 4 倍，计算的复杂性没有明显的增加. 对于隐格式和 Crank－Nicolson 格式，最大的优点是绝对稳定，不会随着维数的增加，步长受到限制，也即时间步长可以放大，但是它在每一层计算的复杂性急剧增加. 在一维的时候，只要计算一个三对角的矩阵，用追赶法求解，计算量是 $O(M-1)$. 当问题是二维的时候，一般要求解的是一个五对角的矩阵，且矩阵阶为 $(M-1)^2$ 的代数方程组，此时无法应用追赶法求解. 只能采用迭代或 *Gauss* 消元法等，其计算量大大增加，比如 *Gauss* 消元法的计算量为 $O(M-1)^6$. 即计算量成指数倍的增长. 如果说在一维的情况下，隐式差分格式优于显式格式，但在高维的情况，这并不一定成立. 它们都各自有各自的优点，因此，希望下面构造的差分格式具有下面的特点：绝对稳定和计算量小. 交替显隐格式具有这样的优点. 构造的思想是在每一个时间层上的计算分成几步进行，而每一步具有一维格式计算简单的优点，也即只需要少量的计算量.

1）Peaceman－Rachford 格式

Peaceman－Rachford 的主要思想是降低维数. 将高维的差分格式分解为几个低维的差分格式，具体做法是 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 在第 $k+\frac{1}{2}$ 层取值，$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 在第 k 层取值. 为了使格式保持对称，下一次计算时，$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 在第 k 层取值，$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 在第 $k+\frac{1}{2}$ 层取值，即

$$\begin{cases} \dfrac{u_{jl}^{k+\frac{1}{2}} - u_{jl}^{k}}{\frac{\tau}{2}} = a\,\dfrac{1}{h^2}(\delta_x^2 u_{jl}^{k+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u_{jl}^{k}), \\ \dfrac{u_{jl}^{k+1} - u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}}{\frac{\tau}{2}} = a\,\dfrac{1}{h^2}(\delta_x^2 u_{jl}^{k+\frac{1}{2}} + \delta_y^2 u_{l}^{k+1}). \end{cases} \tag{26}$$

从上面的式子可以看出，对于每个差分格式，只需要求解一个三对角矩阵的方程组，大大降低了计算量. 它的计算量只有 Crank－Nicolson 格式的 $\frac{1}{7}$，与最简显格式的计算量相当. 另外它的形式对称，结构简单合理，存储单元少.

再考虑稳定性. 通过 Fourier 分析方法得到传播因子为

$$G(r) = \frac{(1-2ar\sin^2\frac{w_1 h}{2})(1-2ar\sin^2\frac{w_2 h}{2})}{(1+2ar\sin^2\frac{w_1 h}{2})(1+2ar\sin^2\frac{w_2 h}{2})},$$

很显然是绝对稳定的.

也可以从下面的途径得到 Peaceman－Rachford 格式，首先将 Crank－Nicolson 格式变形为

$$u_{jl}^{k+1} - \frac{ar}{2}[\delta_x^2 u_{jl}^{k+1} + \delta_y^2 u_{jl}^{k+1}] = u_{jl}^{k} + \frac{ar}{2}[\delta_x^2 u_{jl}^{k} + \delta_y^2 u_{jl}^{k}],$$

因为 $\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2(u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^k)=\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2[\tau^2\delta_t u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}+O(\tau^2)]$,

将上式的左边加上$\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2u_{jl}^{k+1}$,右边加上$\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2[u_{jl}^k+\delta_t u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}+O(\tau^2)]$,得到

$$
\begin{aligned}
&u_{jl}^{k+1}-\frac{ar}{2}[\delta_x^2u_{jl}^{k+1}+\delta_y^2u_{jl}^{k+1}]+\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2u_{jl}^{k+1}\\
&=u_{jl}^k+\frac{ar}{2}[\delta_x^2u_{jl}^k+\delta_y^2u_{jl}^k]+\frac{a^2r^2}{4}\delta_x^2\delta_y^2[u_{jl}^k+\tau^2\delta_t u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}+O(\tau^2)].
\end{aligned}
$$

忽略高阶无穷小量,并因式分解得到

$$(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+1}=(1+\frac{ar}{2}\delta_x^2)(1+\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^k. \tag{27}$$

取 $(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}=(1+\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^k$,

则 $(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+1}=(1+\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}$,

联立得到

$$
\begin{cases}
(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}=(1+\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^k,\\
(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+1}=(1+\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}.
\end{cases}
$$

它与(26)是相同的.从上面的讨论可以得到此格式局部截断误差为$O(\tau^2+h^2)$.

2) Douglas 格式

Peaceman－Rachford 格式的缺点是无法推广到三维的情况.因为它不能像二维格式那样具有对称形式的传播因子,无条件稳定性不成立.下面的格式可以推广到三维的情况.

在式(27)两端同时减去$(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^k$,整理可得

$$(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)(u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^k)=ar(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{jl}^k \tag{28}$$

则 PR 格式可以认为是(28)式引入中间层变量$u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}$得到的结果,令

$$u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}-u_{jl}^k=(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)(u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^k)$$

则得 Douglas 格式

$$
\begin{cases}
(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}-u_{jl}^k)=ar(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{jl}^k,\\
u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}=\frac{ar}{2}\delta_y^2(u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^k).
\end{cases}
$$

此格式称为 Douglas 格式,它的稳定性、局部截断误差和 Peaceman－Rachford 格式是相同的.

三维的 Douglas 格式可以从二维 Douglas 格式推广而来，(28) 在三维时可以改写为如下形式

$$(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_z^2)\cdot(u_{ijl}^{k+1}-u_{ijl}^k)=ar(\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_z^2)u_{ijl}^k$$

然后再引入中间层变量 $u_{ijl}^{k+\frac{1}{3}}$，其中

$$u_{ijl}^{k+\frac{1}{3}}=u_{ijl}^k+(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)(1-\frac{ar}{2}\delta_z^2)\cdot(u_{ijl}^{k+1}-u_{ijl}^k)$$

则 Douglas 格式为

$$\begin{cases}(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)(u_{ijl}^{k+1/3}-u_{ijl}^k)=ar(\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_z^2)u_{ijl}^k,\\ u_{ijl}^{k+2/3}-u_{ijl}^{k+1/3}=\frac{ar}{2}\delta_y^2(u_{ijl}^{k+2/3}-u_{ijl}^k),\\ u_{ijl}^{k+1}-u_{ijl}^{k+2/3}=\frac{ar}{2}\delta_z^2(u_{ijl}^{k+1}-u_{ijl}^k).\end{cases}$$

3) 局部一维格式

我们将从两个不同的角度来构造局部一维格式

首先，将一个二维抛物方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=0$在$[t_k,t_{k+1}]$上可以看成两个一维抛物方程的近似叠加，即

$$\begin{cases}\frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0, & t\in[t_k,t_{k+1/2}]\\ \frac{1}{2}\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0, & t\in[t_{k+1/2},t_{k+1}]\end{cases}.$$

如果我们对上述方程都采用最简显格式离散，我们得到显式局部一维格式

$$\begin{cases}\frac{1}{2}\frac{u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}-u_{jl}^k}{\tau}=\frac{ar}{2}\delta_x^2u_{jl}^k\\ \frac{1}{2}\frac{u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}}{\tau}=\frac{ar}{2}\delta_y^2u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}\end{cases}$$

如果我们对上述方程都采用 CN 格式离散，我们得到隐式局部一维格式

$$\begin{cases}\frac{u_{jl}^{n+\frac{1}{2}}-u_{jl}^n}{\tau}=\frac{a}{h^2}\delta_x^2(\frac{u_{jl}^{n+\frac{1}{2}}+u_{jl}^n}{2})\\ \frac{u_{jl}^{n+1}-u_{jl}^{n+\frac{1}{2}}}{\tau}=\frac{a}{h^2}\delta_y^2(\frac{u_{jl}^{n+1}+u_{jl}^{n+\frac{1}{2}}}{2})\end{cases}$$

实际计算不用上面的公式，而是采用

$$\begin{cases}(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}=(1+\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^k\\(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+1}=(1+\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}\end{cases}$$

第二，我们也可以从 PR 格式出发，在(27) 中引入中间层的变量 $u_{i,j}^{k+1/2}$，将式(27) 改写为如下形式

$$\begin{cases}(1-\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}=(1+\frac{ar}{2}\delta_x^2)u_{jl}^k\\(1-\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+1}=(1+\frac{ar}{2}\delta_y^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}\end{cases},$$

也即我们的隐式局部一维格式。

这个格式的特点是，每个格式只涉及一个变量的差分，每个差分格式单独来看，是不相容的，但将两个差分格式叠加后来看，它是与 Peaceman－Rachford 格式等价的。由于是两个隐式格式，只需要用两次追赶法就可以求解得到 u_{jl}^{k+1}。但它能顺利推广到三维或者更高维的情况。

4）预测 — 校正格式

具体的思路是：在中间层进行局部一维的预测，在时间层上用最简显式格式进行校正，例如，二维抛物方程的预测 — 校正为

$$\begin{cases}u_{jl}^{k+\frac{1}{4}}-u_{jl}^k=\frac{ar}{2}\delta_x^2u_{jl}^{k+\frac{1}{4}}\\u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}-u_{jl}^{k+\frac{1}{4}}=\frac{ar}{2}\delta_y^2u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}\\u_{jl}^{k+1}-u_{jl}^k=ar(\delta_x^2+\delta_y^2)u_{jl}^{k+\frac{1}{2}}\end{cases}$$

在 $\frac{1}{4}$ 的时间层和 $\frac{1}{2}$ 时间层的差分格式称为预测格式，在 $k+1$ 时间层用二维抛物方程进行校正，称为校正格式。我们只要消除中间层，可以得到它与 Douglas 格式等价，于是局部截断误差和稳定性以及计算形式都与 Douglas 格式相同。

三维抛物方程的预测 — 校正格式

$$\begin{cases}u_{ijl}^{k+\frac{1}{6}}-u_{ijl}^k=\frac{ar}{2}\delta_x^2u_{ijl}^{k+\frac{1}{6}}\\u_{ijl}^{k+\frac{1}{3}}-u_{ijl}^{k+\frac{1}{6}}=\frac{ar}{2}\delta_y^2u_{ijl}^{k+\frac{1}{3}}\\u_{ijl}^{k+\frac{1}{2}}-u_{ijl}^{k+\frac{1}{3}}=\frac{ar}{2}\delta_z^2u_{ijl}^{k+\frac{1}{2}}\\u_{ijl}^{k+1}-u_{ijl}^k=ar(\delta_x^2+\delta_y^2+\delta_z^2)u_{ijl}^{k+\frac{1}{2}}\end{cases}$$

前面三个差分格式局部一维的隐式格式，是预测格式，最后的差分格式是三维抛物方程的显式格式，是校正格式。

习　题

1. 求抛物方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$的半显式差分格式

$$\frac{1}{\tau}(u_j^{k+1}-u_j^k)=\frac{a}{h^2}(u_{j+1}^k-u_j^k+u_{j-1}^{k+1}-u_j^{k+1})$$

的局部截断误差和稳定性条件。

2. 求抛物方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$的三层差分格式

$$(1+\theta)\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-\theta\frac{u_j^k-u_j^{k-1}}{\tau}=a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}$$

的局部截断误差，并证明当$\theta=\frac{1}{2}+\frac{1}{12ar}$时，局部截断误差达到最高阶，为$O(\tau^2+h^4)$。

3. 求抛物方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0$的三层差分格式

$$\frac{3}{2}\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}-\frac{1}{2}\frac{u_j^k-u_j^{k-1}}{\tau}=a\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{h^2}$$

的局部截断误差及稳定性。

4. 试构造方程$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}(x\frac{\partial u}{\partial x})$的显式格式，并研究它的稳定性条件。

5. 试构造方程$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{1}{1+x}\frac{\partial u}{\partial x}$的显式格式，并研究它的稳定性条件。

6. 试构造二维抛物方程$\frac{\partial u}{\partial t}-a(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=0$的 Du Fort－Frankel 格式，并讨论它的相容性条件和稳定性。

7. 将局部一维格式推广到三维情况，并证明它的绝对稳定性。

上机练习

用差分格式计算下面的定解问题

1. $\begin{cases}\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=0, & 0<x<1, T\geqslant t>0,\\ u(0,t)=u(1,t)=0, & \\ u(x,0)=\sin\pi x, & 0<x<1.\end{cases}$　　精确解为$u(x,t)=e^{-\pi^2 t}\sin\pi x$.

2. $\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < 1, 1 \geqslant t > 0, \\ u(x,0) = \mathrm{e}^x, \quad 0 < x < 1, \\ u(0,t) = \mathrm{e}^t, u(1,t) = \mathrm{e}^{1+t} \quad 0 < t \leqslant 1. \end{cases}$ 精确解为 $u(x,t) = \mathrm{e}^{x+t}$.

3. $\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < 1, T \geqslant t > 0, \\ u(0,t) = u(1,t) = 0, \\ u(x,0) = \begin{cases} cx, & 0 \leqslant x \leqslant \dfrac{1}{2}, \\ c(1-x), & \dfrac{1}{2} \leqslant x \leqslant 1. \end{cases} \end{cases}$

精确解 $u(x,t) = \dfrac{4c}{\pi^2} \sum\limits_{k=0}^{\infty} \dfrac{(-1)^k}{(2k+1)^2} \exp\left(-(2k+1)^2 \pi^2 t\right) \sin(2k+1)\pi x$.

要求：计算一些节点的值；画出精确解得曲面图；分别取 $h = \frac{1}{50}, \tau = \frac{1}{100}$；$h = \frac{1}{100}, \tau = \frac{1}{200}$ 所得到数值解得曲面图；画出误差的曲面图.

第3章　双曲方程的差分方法

3.1　一阶常系数双曲型方程简介

本节主要讨论对流方程.首先考虑常系数方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad 0\leqslant x\leqslant l,t\geqslant 0,$$

其中 a 是常数,不妨设 $a>0$.这就是最简单的双曲方程,一般称为对流方程.

它的初值为　　$u(x,0)=f(x),\quad 0\leqslant x\leqslant l,$

它的边界条件为　　$u(0,t)=\varphi_0(t),\quad t\geqslant 0,$

其中 $f(0)=\varphi_0(0)$.

为了讨论方便,设常数 $a>0$.对流方程的特征方程是常微分方程 $\mathrm{d}x-a\mathrm{d}t=0$,求解微分方程,得到一组解,$x-at=\xi$.很显然,它们是一组相互平行的直线(如图3.1所示),称这组直线为对流方程的特征线.沿每条特征线,$u(x,t)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial t}=\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0.$$

因此,沿每一条特征线,对流方程的解 $u(x,t)$ 是常数.利用特征线,可以求出初边值问题的解析解.以初值问题为例说明如何得到解析解.

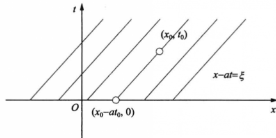


图 3.1

设(x_0,t_0) 是 $x-t$ 平面上任意一点,过此点的特征线为 $x-at=\xi$,由此 $\xi=x_0-at_0$,于是,得到特征线与空间坐标轴 x 轴的交点为$(x_0-at_0,0)$(如图3.1所示).根据前面的讨论可

知，在特征线上，偏微分方程的解是常数，即在此点的值 $u(x_0,t_0)$ 等于 $u(x_0-at_0,0)$，也即为所给的初值 $\varphi(x_0-at_0)$. 由于点 (x_0,t_0) 的任意性，方程的解为 $u(x,t)=\varphi(x-at)$. 类似地，可以求出从边界出发时，偏微分方程的解析解. 如果给出初始条件和边界条件，可以得到对流方程的解析解

$$u(x,t)=\begin{cases} f(\xi), & \xi\geqslant 0, \\ \varphi_0(\xi), & \xi\leqslant 0. \end{cases}$$

又因为 $x-at=\xi$，所以

$$u(x,t)=\begin{cases} f(x-at), & at\leqslant x, \\ \varphi_0(at-x), & at\geqslant x. \end{cases}$$

当它的边界条件变为

$$u(l,t)=\varphi_1(t),\ \geqslant 0,$$

时，则对流方程的解析解为

$$u(x,t)=\begin{cases} f(x-at), & t\leqslant \dfrac{x-l}{a}, \\ \varphi_1\left(t-\dfrac{x-l}{a}\right), & \dfrac{x-l}{a}\leqslant t\leqslant T, \end{cases} \quad 0\leqslant x\leqslant l.$$

我们为什么先从对流方程开始研究双曲型方程的数值解法呢?原因有如下几条：第一，对流方程非常简单，对它的研究是探讨更复杂的双曲型方程(组) 的基础. 其次，尽管对流方程简单，但是通过它可以看到双曲方程在数值计算中特有的性质和现象. 第三，利用它的特殊的、复杂的初值给定，完全可以用来检验数值方法的效果和功能. 最后，它的差分格式可以推广到变系数双曲方程(组) 以及非线性双曲方程领域. 比如

变系数对流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a(x)\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad 0\leqslant x\leqslant l,t\geqslant 0,$$

非线性的 Burgers 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial u^2}{\partial x}=0,\quad x\in \mathbf{R},t\geqslant 0,$$

KdV 方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+k\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{3k}{4\rho}\frac{\partial u^2}{\partial x}+\frac{k\rho^2}{6}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}=0,\quad x\in \mathbf{R},t\geqslant 0.$$

双曲型方程与椭圆型方程的重要区别是，双曲方程具有特征线，其解析解对初边值具有很强的依赖性，初边值函数的各种性质也沿特征线传播. 因此，方程的解一般不具有很好的光滑性. 下面讨论双曲型方程的一些常用格式.

3.2　几种显式差分格式

1. 迎风格式

沿用抛物方程构造差分格式的方法，按照差商代替微商的方法，我们自然得到如下三种差分格式：

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_j^n}{h}=0,0\leqslant j\leqslant M,0\leqslant n\leqslant N,$$

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}=0,1\leqslant j\leqslant M,0\leqslant n\leqslant N,$$

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{h}=0,1\leqslant j\leqslant M,0\leqslant n\leqslant N. \tag{1}$$

前面两种格式的截断误差为 $O(\tau+h)$，第三种格式的局部截断误差是 $O(\tau+h^2)$. 下面讨论这三种格式的稳定性，依然采用 Fourier 分析方法，令 $u_j^k=v^k e^{iwjh}$，分别代入上面三种差分格式，则分别得到它们的传播因子为

$$G_1(r)=are^{iwh}+(1-ar),$$

$$G_2(r)=-are^{iwh}+(1+ar),$$

$$G_3(r)=1-iar\sin wh.$$

很显然，$|G_3(r)|=\sqrt{1+a^2r^2\sin^2 wh}>1$，因此对于任何网格比，第三种差分格式不满足稳定的条件，是绝对不稳定的.

另外，从 $|G_1(r)|=|1-4ar(1+ar)\sin^2\frac{wh}{2}|\leqslant 1$ 的充要条件为 $a^2r^2\leqslant ar$，由此得到第一种格式稳定的充要条件是 $a>0$，且 $ar\leqslant 1$. 同理，第二种格式稳定的充要条件是 $a<0$，且 $|ar|\leqslant 1$. 由此可以看出，前两种格式的稳定性与系数的正负号相关，也即与特征线的走向相关. 于是根据特征线的走向给出差分格式如下

$$u_j^{n+1}=(1-ar)u_j^n+aru_{j-1}^n,\quad (a>0),（如图 3.2 所示）$$

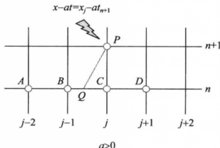


图 3.2

$$u_j^{n+1} = (1 + ar)u_j^n - aru_{j+1}^n, \quad (a < 0)$$,(如图 3.3 所示)

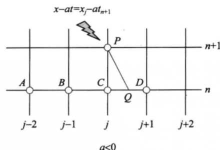


图 3.3

在计算物理中,此格式也称迎风格式.

下面从特征线的角度推导迎风格式.以 $a > 0$ 为例,设 $u_{j+1}^n, u_j^n, u_{j-1}^n$ 已知,构造计算 u_j^{n+1} 的公式.如图 3.2 所示,过点 $P(x_j, t_{n+1})$ 作特征线,由于 $a > 0$,特征线的斜率 $\frac{dt}{dx} = \frac{1}{a}$,则特征线偏左,与直线 $t = t_n$ 相交于点 B 和 C 之间的 Q 点.又因为 Q 点在特征线上,恒为常数,则 $u(P) = u(Q)$.考虑利用网格节点 B 和 C 的值进行插值,插值作为 Q 点的近似值,得到

$$u(P) = u(Q) \approx (u(B) \mid CQ \mid + u(C) \mid BQ \mid) \frac{1}{h}, \tag{2}$$

利用直角三角形 ΔPCQ 以及直线 PQ 的斜率,可以计算出

$$\mid CQ \mid = a\tau, \mid BQ \mid = h - a\tau, \tag{3}$$

$$u(P) = u_j^{n+1}, u(B) = u_{j-1}^n, u(C) = u_j^n, r = \frac{\tau}{h}. \tag{4}$$

于是把(3)(4) 代入(2) 得到

$$u_j^{n+1} = aru_{j-1}^n + (1 - ar)u_j^n.$$

此式即是上述的迎风格式.对于 $a < 0$ 可以类似地得到.

算例 1:请用迎风格式计算双曲方程的近似解

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial u}{\partial x} = 2t\sin x + t^2\cos x, \\ u\mid_{t=0} = 0 \quad 0 < t < 10, \\ u\mid_{x=0} = 0 \quad 0 < x < 5. \end{cases}$$

真解的曲面图如图 3.4 所示,时间步长 $\tau = 0.1$ 空间步长 $h = 0.2$ 时近似解的曲面图如图 3.5 所示,误差曲面图如图 3.6 所示.

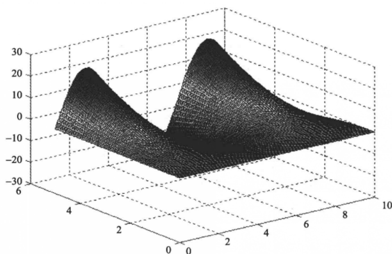


图 3.4　真解的曲面图

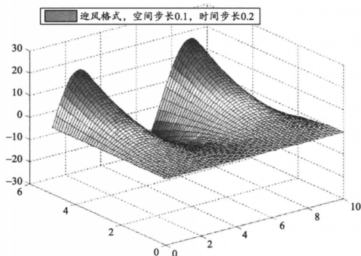


图 3.5　近似解曲面图

此时的最大误差为 MaxErr $= 2.9274$。

当时间步长 $\tau = 0.05$，空间步长 $h = 0.08$ 时，近似解曲面图和误差曲面图分别为图 3.7 和图 3.8 所示。

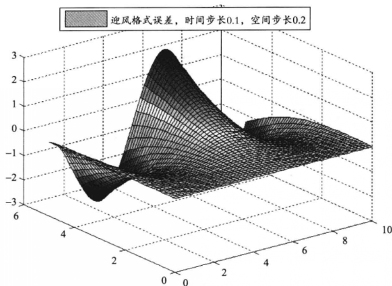


图 3.6 误差曲面图

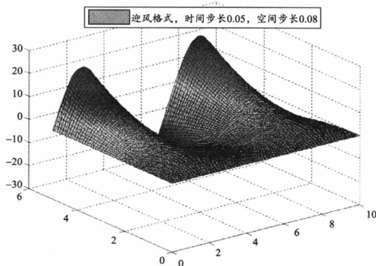


图 3.7 近似解曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 1.2187。

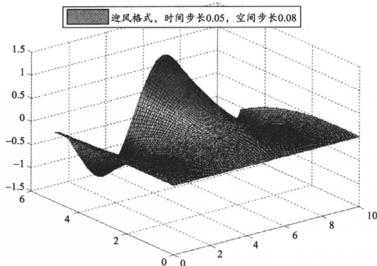


图 3.8　误差曲面图

2. Lax 格式

通过特征线得到的迎风格式是利用节点插值作为近似值，推导出迎风格式. 沿着此思路，也可以构造 Lax 差分格式. 不过，此时利用网格节点 B 和 D 进行线性插值.

$$u(P)=u(Q)\approx\frac{h-a\tau}{2h}u(D)+\frac{h+a\tau}{2h}u(B),$$

即

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}[(1+ar)u_{j-1}^n+(1-ar)u_{j+1}^n],$$

令 $u_j^n=v^n\mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}$，代入上式，得

$$\begin{aligned}v^{n+1}&=[\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh})-\frac{ar}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}wh}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}wh})]v^n\\&=(\cos wh-\mathrm{i}ar\sin wh)v^n,\end{aligned}$$

得到 Lax 的传播因子

$$G(r)=\cos wh-\mathrm{i}ar\sin wh,$$

于是 $|G(r)|^2=1-(1-a^2r^2)\sin^2 wh$.

所以当 $|ar|\leqslant 1$ 时，$|G(r)|\leqslant 1$，Lax 格式稳定. 否则，$|G(r)|\geqslant 1$，此格式不稳定. 因此 Lax 格式稳定的条件是 $|ar|\leqslant 1$.

Lax 格式也可以改写为

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n)-\frac{ar}{2}(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n),$$

把此格式与(1) 进行比较，实际上，(1) 是绝对不稳定的，为了使其稳定，而且不损失局部截断误差的精度，于是用节点$(j-1,n)$与$(j+1,n)$的值平均加权代替u_j^n，即用$\frac{1}{2}(u_{j-1}^n+u_{j+1}^n)$代替$u_j^n$. 此格式的截断误差是$O(\tau+h^2+\frac{h^2}{\tau})$.

除了上述构造差分格式的方法外，我们还可以考虑从积分守恒形式出发构造差分格式. 设Ω是(x,t)平面的任一有界区域，对对流方程两边同时在区域Ω上积分，即

$$\int_\Omega\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=\int_\Omega f\mathrm{d}x\mathrm{d}t,$$

对上式左端运用 Green 公式

$$\int_\Omega\left(\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=\int_\Gamma u\mathrm{d}t-u\mathrm{d}x,$$

则
$$\int_\Gamma u\mathrm{d}t-u\mathrm{d}x=\int_\Omega f\mathrm{d}x\mathrm{d}t,$$

其中$\Gamma=\partial\Omega$表示区域Ω的边界.

取Ω是以节点$A(j-1,n)$，$B(j+1,n)$，$C(j+1,n+1)$，$D(j-1,n+1)$为顶点的矩形区域(如图 3.9 所示)，其边界$\Gamma=\overline{ABCDA}$，则

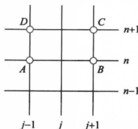


图 3.9 节点结构图

$$\begin{aligned}\int_\Gamma u\mathrm{d}t-u\mathrm{d}x&=\int_{\overline{AB}\cup\overline{BC}\cup\overline{CD}\cup\overline{DA}}(u\mathrm{d}t-u\mathrm{d}x)\\&=-\int_{\overline{AB}}u\mathrm{d}x-\int_{\overline{CD}}u\mathrm{d}x+\int_{\overline{BC}}u\mathrm{d}t+\int_{\overline{DA}}u\mathrm{d}t,\end{aligned}\tag{5}$$

对上面公式的右端，分别利用矩形积分公式和梯形公式，即

$$\int_{\overline{AB}}u\mathrm{d}x=\frac{1}{2}[u(A)+u(B)]\cdot 2h+O(h^3),$$

$$\int_{\overline{CD}}u\mathrm{d}x=-u(x_j,t_{n+1})\cdot 2h+O(h^3),$$

$$\int_{\overline{BC}}u\mathrm{d}t=u(B)\cdot\tau+O(\tau^2)$$

$$\int_{\overline{DA}} u\,\mathrm{d}t = -u(A)\cdot\tau + O(\tau^2),$$

$$\int_{\Omega} f\,\mathrm{d}x\mathrm{d}t = f_j^n \tau h + O(h^2+\tau^2).$$

把上面的式子代入(5),并且整理得到

$$u(x_j,t_{n+1})\cdot 2h - \frac{1}{2}[u(A)+u(B)]\cdot 2h + u(B)\cdot\tau - u(A)\cdot\tau = 2f_j^n\tau h + O(\tau^2+h^3),$$

两边同时除以 τh 整理得

$$\frac{u(x_j,t_{n+1}) - \frac{1}{2}[u(A)+u(B)]}{\tau} + \frac{u(B)-u(A)}{2h} = f_j^n + O(\tau + h^2/\tau),$$

即

$$\frac{u_j^{n+1} - \frac{1}{2}[u_{j+1}^n + u_{j-1}^n]}{\tau} + \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = f_j^n + O(\tau + h^2/\tau),$$

忽略高阶无穷小量,有

$$\frac{u_j^{n+1} - \frac{1}{2}[u_{j+1}^n + u_{j-1}^n]}{\tau} + \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = f_j^n.$$

即为 Lax 格式,被忽略的无穷小量是局部截断误差.

算例 2:请用 Lax 格式求算例 1 方程的近似解.

近似解曲面图如图 3.10 所示,

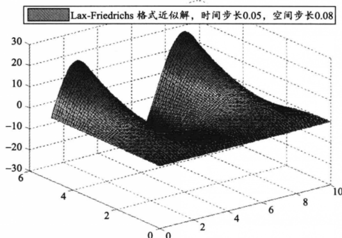


图 3.10　近似解曲面图

近似解与真解的误差曲面图如图 3.11 所示.

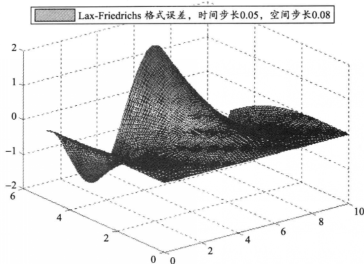


图 3.11　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 1.8757

当时间步长 $\tau = 0.01$,空间步长 $h = 0.02$ 时,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.12 和图 3.13 所示。

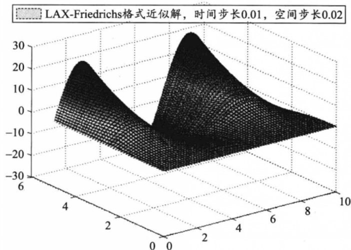


图 3.12　近似解曲面图

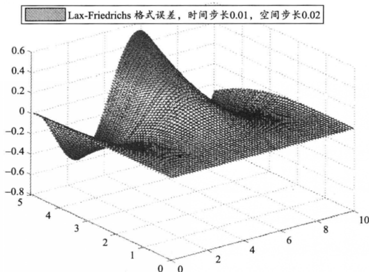


图 3.13　误差曲面图

此时最大误差为 MaxErr = 0.5871

3. Lax－Wendroff 格式

考虑齐次对流微分方程，下面我们通过三种不同的思路构造 Lax—Wendroff 格式. 此格式是二阶精度.

第一种思路：利用微分方程和 Taylor 公式.

由 Taylor 展开公式，得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \tau \left[\frac{\partial u}{\partial t}\right]_j^n + \frac{\tau^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right]_j^n + O(\tau^3), \tag{6}$$

因为是齐次微分方程，则

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a\frac{\partial u}{\partial x}, \tag{7}$$

对上式两边同对时间 t 求导，则

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(-a\frac{\partial u}{\partial x}\right) = -a\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = -a\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) = -a\frac{\partial}{\partial x}\left(-a\frac{\partial u}{\partial x}\right) = a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \tag{8}$$

把(7)(8) 代入(6) 得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n - a\tau\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n + \frac{a^2\tau^2}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n + O(\tau^3),$$

再由空间的一阶中心差商和二阶中心差商,即

$$\left[\frac{\partial u}{\partial x}\right]_j^n = \frac{1}{2h}[u_{j+1}^n - u_{j-1}^n] + O(h^2),$$

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_j^n = \frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^n + O(h^2),$$

从(6) 得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n - a\tau\,\frac{1}{2h}[u_{j+1}^n - u_{j-1}^n] + \frac{a^2\tau^2}{2}\,\frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^n + O(\tau^3) + O(h^2),$$

忽略高阶无穷小量,得到

$$u_j^{n+1} = u_j^n - a\tau\,\frac{1}{2h}[u_{j+1}^n - u_{j-1}^n] + \frac{a^2\tau^2}{2}\,\frac{1}{h^2}\delta_x^2 u_j^n.$$

这就是 Lax—Wendroff 格式,它的局部截断误差是 $O(h^2+\tau^2)$.

下面讨论 Lax—Wendroff 格式的稳定性. 将格式改写为

$$u_j^{n+1} = \frac{1}{2}(a^2r^2 - ar)u_{j+1}^n + (1 - a^2r^2)u_j^n + \frac{1}{2}(a^2r^2 + ar)u_{j-1}^n,$$

利用 Fourier 分析方法,得到传播因子

$$G(r) = 1 - 2a^2r^2\sin^2\frac{wh}{2} - \mathrm{i}ar\sin wh,$$

因此

$$|G(r)|^2 = 1 - 4a^2r^2(1-a^2r^2)\sin^4\frac{wh}{2}.$$

很显然,当 $|ar|\leqslant 1$ 时, $|G(r)|\leqslant 1$,即格式的稳定条件是 $|ar|\leqslant 1$.

这个格式可以看成如下两步合成的结果

$$\begin{cases} u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_j^n) - \dfrac{ar}{2}(u_{j+1}^n - u_j^n), \\ u_j^{n+1} = u_j^n - ar(u_{j+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - u_j^n), \end{cases}$$

其中第一个格式是 Lax—Friedrichs 格式,第二个格式是下面将要讨论的“跳蛙”格式(菱形格式). 同样是二阶精度.

第二种思路:与 Lax—Friedrichs 格式类似,也可以利用特征线来构造. 以 $a>0$ 为例,图 3.2 所示,此时,利用网格节点 B, C 和 D 三点的二次插值作为 Q 点的函数值的近似值,即得

$$u(P) = u(Q) \approx u(C) - \frac{a\tau}{h}[u(C) - u(B)] - \frac{1}{2}\cdot\frac{a\tau}{h}\left(1 - \frac{a\tau}{h}\right)[u(B) - 2u(C) + u(D)],$$

代入节点的坐标,并整理,得到 Lax— Wendroff 格式:

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}ar(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}a^2r^2(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n).$$

第三种思路：为了增加对流方程的稳定性，通常考虑添加微小参数作为系数的扩散项来提高微分方程的稳定性，此项称为人工粘性项. 此时，对流方程成为带小参数的抛物方程，如

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = \varepsilon\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (\varepsilon > 0) \text{ 并且当 } \tau \to 0 \text{ 时}, \varepsilon \to 0,$$

令 $\varepsilon = \frac{1}{2}a^2\tau$，然后构造上述抛物方程的差分格式. $\frac{\partial u}{\partial t}$ 用向前差商近似，$\frac{\partial u}{\partial x}$ 和 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 分别用一阶中心差商和二阶中心差商近似，得到 Lax—Wendroff 格式如下：

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{1}{2}ar(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{1}{2}a^2r^2(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n).$$

实际上，前面讨论的几种对流方程的差分格式都可以看作是粘性差分格式. 例如迎风格式

$$u_j^{n+1} = (1 - ar)u_j^n + aru_{j-1}^n, \quad (a > 0)$$

将其改写为如下格式

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = \frac{ah}{2}\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2},$$

其中 $\varepsilon = \frac{1}{2}ah$.

对于系数 $a < 0$，类似地有

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = -\frac{ah}{2}\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2},$$

它们是抛物方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2}|a|h\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的中心差商近似. 其中 $\varepsilon = \frac{1}{2}|a|h$.

Lax—Friedrichs 格式改写为

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = \frac{h}{2r}\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + 2u_{j-1}^n}{h^2},$$

它是抛物方程 $\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{h^2}{\tau}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ 的中心差分近似. 其中令 $\varepsilon = \frac{1}{2}\frac{h^2}{\tau}$.

下面根据上述粘性差分格式，来讨论迎风格式和 Lax—Friedrichs 格式在局部截断误差上的区别. 这两种格式都以 $O(\tau + h^2)$ 的误差精度逼近对流方程本身，但是 Lax—Friedrichs 格式的右端可改写为

$$\frac{1}{ar}\cdot\frac{ah}{2}\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2}.$$

再与迎风格式作比较发现，根据稳定性条件 $ar \leqslant 1$，Lax—Friedrichs 格式的局部截断误差大于迎风格式的误差. 只有在 $ar = 1$ 时，两者才相等.

算例 3:用 Lax—Wendroff 格式计算算例 1 的近似值,其中步长为 $h=0.2,\tau=0.1$ 时. 图 3.14 和图 3.15 分别是近似解的曲面图和误差曲面图.

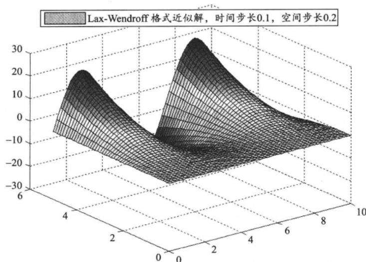


图 3.14 近似解曲面图

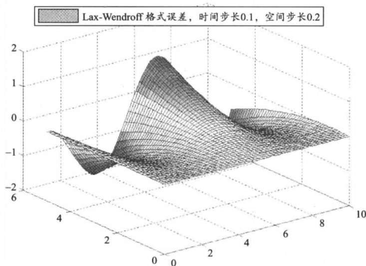


图 3.15 误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 1.6008。

当步长取更小时，比如 $h = 0.05$，$\tau = 0.08$. 可以计算得到最大误差为 $e_{\max} = -0.8011$. 其近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.16 和图 3.17 所示.

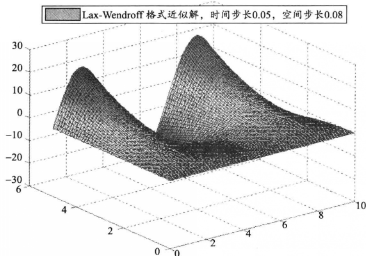


图 3.16　近似解曲面图

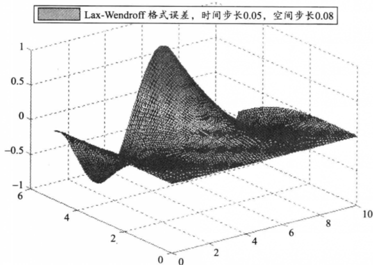


图 3.17　误差曲面图

此时的最大误差 MaxErr = 0.8011.

4. 跳蛙格式(Leap — Frog)

对于对流方程,对时间的微商和空间的微商都用中心差商近似,得到如下差分格式.

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=f_j^n,$$

即为:

$$u_j^{n+1}=u_j^{n-1}-ar(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)+f_j^n,$$

其局部截断误差 $O(\tau^2+h^2)$.

分析跳蛙格式的稳定性,它是一个三层格式,采用 Fourier 分析方法,得到传播矩阵如下

$$G(r)=\begin{pmatrix}-2ari\sin wh & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

传播矩阵的特征方程是

$$\lambda^2+2\lambda iar\sin wh-1=0,$$

求解特征值得

$$\lambda_{1,2}=-iar\sin wh\pm\sqrt{1-a^2r^2\sin^2 wh},$$

当 $|a|r<1$ 时,$|\lambda_{1,2}|^2=1-a^2r^2\sin^2 wh+a^2r^2\sin^2 wh=1$,并且 $\lambda_1\neq\lambda_2$,即是相异的两根,于是满足 Von Neumann 条件,因此跳蛙格式稳定. 然而,当 $|a|r=1$ 时,则 $\lambda_1=\lambda_2=-iar\sin wh\pm ar\cos wh$. 如果令 $wh=\frac{\pi}{2}$,则有 $\lambda_{1,2}=-iar\sin wh$,即两个相同的根. 下面讨论此时的稳定性. 此时的传播矩阵为

$$G(r)=\begin{vmatrix}-2i & 1\\ 1 & 0\end{vmatrix},$$

通过计算得到

$$G^2(r)=\begin{vmatrix}-3 & -2i\\ -2i & 1\end{vmatrix},G^4(r)=\begin{vmatrix}5 & 4i\\ 4i & -3\end{vmatrix},\cdots$$

由归纳法可以得到

$$G^{2^n}(r)=\begin{vmatrix}2^n+1 & 2^n i\\ 2^n i & 1-2^n\end{vmatrix},n\geqslant 2,$$

根据矩阵范数的定义

$$\|G^{2^n}(r)\|_\infty=2^n+1.$$

因此,此时蛙跳格式是不稳定的.

称这样的差分格式是临界稳定或者中立稳定的,这与对流方程本身的临界稳定性质是吻合的.

算例 4:用跳蛙格式计算例 1 的近似解. 当步长为 $h=0.2,\tau=0.1$ 时,图 3.18 和图 3.19 是近似解的曲面图和误差曲面图.

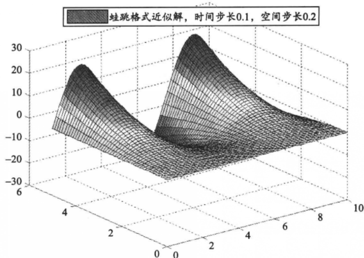


图 3.18　近似解曲面图

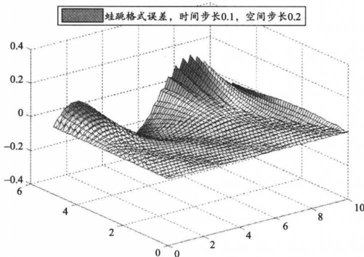


图 3.19　误差曲面图

最大误差是 $e_{\max}=-0.2690$. 当步长取更小时，比如 $h=0.05$，$\tau=0.08$，可以计算得到最大误差为 $e_{\max}=-0.0466$. 其近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.20 和图 3.21 所示.

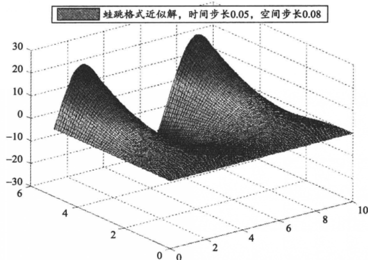


图 3.20 近似解曲面图

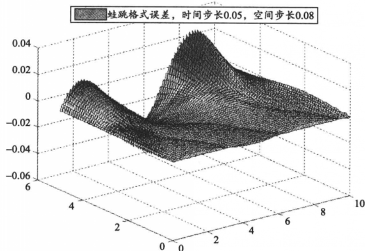


图 3.21 误差曲面图

3.3 Courant 条件

在学习双曲型偏微分方程的理论时，双曲偏微分方程的解析解存在依赖域. 与微分方程类似，双曲差分方程也有依赖域. 实际上，Courant 等人证明了，差分方程的依赖域包含偏微分方

程的依赖域时，差分格式是收敛的，称此条件为 Courant 条件. 下面通过实际例子来验证此条件. 严格的数学证明在此书中不作讨论.

假设系数 $a>0$，考虑微分方程的特征线方程 $\dfrac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}=\dfrac{1}{a}$，设点 P 为任意网格节点，过点 P 微分方程的特征线为 PD（如图 3.22 所示），而差分格式的特征线的斜率是 $\dfrac{\Delta t}{\Delta x}=\dfrac{\tau}{h}$，因此差分格式的特征线是 PB.

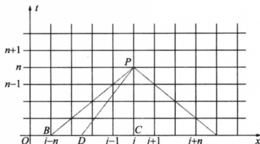


图 3.22　微分方程的特征线

考虑迎风格式，由迎风格式可以知道，要得到节点 P 的值，它需要用到节点 B 和 C 点的值. 由此线段 BC 是差分格式的依赖域. 如果点 D 不在 BC 线段上，则从差分格式计算出点 P 的值就与点 D 的值无关，然而微分方程点 P 的值必须依赖于点 D 的值. 因此，此时差分格式要收敛到微分方程的解是不可能的. 在 $x-t$ 的直角坐标系中，要使点 D 在 BC 线段上，就必须使 PD 线段斜率大于 PB 线段的斜率，即 $\dfrac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}=\dfrac{1}{a}\geqslant\dfrac{\Delta t}{\Delta x}=\dfrac{\tau}{h}$，也即 $ar\leqslant 1$. 这正是迎风格式稳定的条件. 因此，要使差分格式收敛于微分方程，除了满足相容条件外，还必须满足 Courant 条件. 当 $a<0$ 时，进行类似地讨论，得到类似的结果.

另外，差分格式类似于微分方程，也有影响域，假设点 A 是网格节点，考虑点 A 的影响域，过 A 点作特征线，根据特征线的走向，得到点 A 的影响域，也即在进行数值计算过程中，需要用到节点 A 的函数值所有节点的集合就是点 A 的影响域. 如图 3.23 所示.

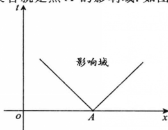


图 3.23　A 点的影响域

3.4 几种隐式差分格式

在前面的章节中，我们具体讨论了对流双曲方程的显式格式，在这一节中介绍三种隐式格式.

1. 最简隐式格式

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau} + a\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h} = 0,$$

即
$$aru_{j+1}^n + 2u_j^n - aru_{j-1}^n = 2u_j^{n-1}.$$

最简隐格式节点结构图如图 3.24 所示.

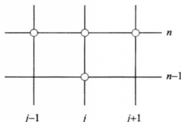


图 3.24　节点结构图

很容易得到此格式的局部截断误差是 $O(\tau + h^2)$.

通过 Fourier 分析方法得到传播因子为

$$G(r) = \frac{1}{1 + ar\mathrm{i}\sin wh} = \frac{1 - \mathrm{i}ar\sin wh}{1 + a^2r^2\sin^2 wh},$$

而

$$|G(r)|^2 = \frac{1}{1 + a^2r^2\sin^2 wh} \leqslant 1.$$

因此，此隐式格式是绝对稳定.

算例 5：用最简隐格式计算算例 1 的近似解和误差。

当时间步长 $\tau = 0.05$，空间步长 $h = 0.08$ 时，近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.25 和图 3.26 所示。

当时间步长 $\tau = 0.01$，空间步长 $h = 0.02$ 时，近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.27 和图 3.28 所示.

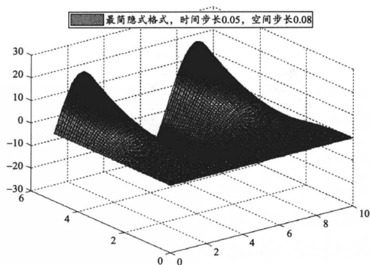


图 3.25　近似解曲面图

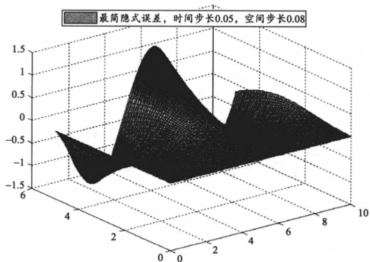


图 3.26　误差曲面图

此时最大误差 MaxErr = 1.3859.

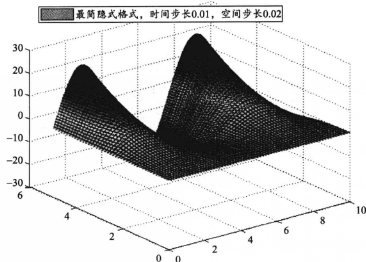


图 3.27 近似解曲面图

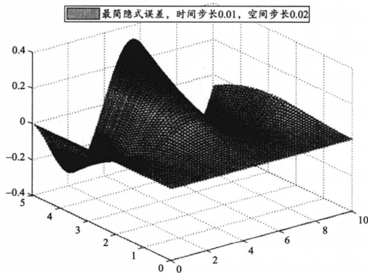


图 3.28 误差曲面图

此时最大误差 MaxErr = 0.3375.

2. Crank－Nicolson 格式

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\tau} + \frac{a}{2}\left(\frac{u_{j+1}^{n-1} - u_{j-1}^{n-1}}{2h} + \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2h}\right) = 0,$$

局部截断误差的阶是 $E = O(\tau^2 + h^2)$. 差分格式节点结构如图 3.29 所示.

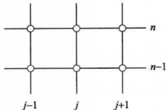


图 3.29　节点结构图

通过 Fourier 分析方法得到传播因子为

$$G(r) = \frac{1 - \mathrm{i}\,\frac{ar}{2}\sin wh}{1 + \mathrm{i}\,\frac{ar}{2}\sin wh},$$

很显然,$|G(r)|^2 = 1$,是单根,Von Neumann 条件时稳定的充要条件,因此是绝对稳定的.

算例 6:用 CN 格式计算上例的近似值. 当时间步长 $\tau = 0.1$,空间步长 $h = 0.2$,图 3.30 和图3.31 是近似解得曲面图和误差曲面图.

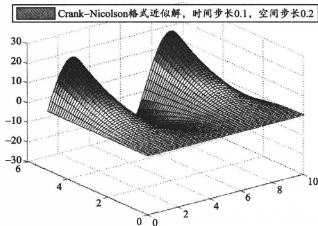


图 3.30　近似解曲面图

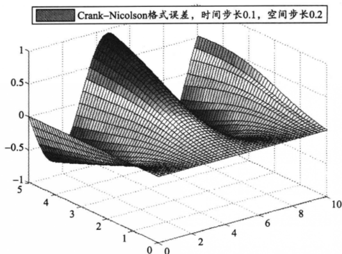


图 3.31　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.9399

当时间步长 $\tau = 0.05$,空间步长 $h = 0.08$ 时的近似解曲面图和误差曲面图分别为图 3.32 和图 3.33 所示.

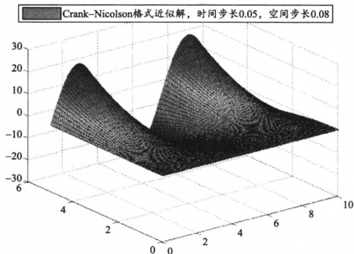


图 3.32　近似曲面图

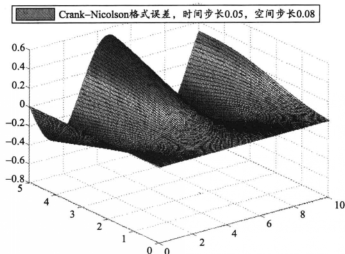


图 3.33　误差曲面图

此时最大的误差 MaxErr = 0.5237

3. Wendroff 格式

考虑如下九个点 $A(j-1,n)$，$B(j,n)$，$C(j,n+1)$，$D(j-1,n+1)$，$E(j-\frac{1}{2},n)$，$F(j,n+\frac{1}{2})$，$G(j-\frac{1}{2},n+1)$，$H(j-1,n+\frac{1}{2})$. 在节点 $P(j-\frac{1}{2},n+\frac{1}{2})$ 处考虑微分方程的取值，即

$$\frac{\partial u(P)}{\partial t}+a\frac{\partial u(P)}{\partial x}=f(P), \tag{9}$$

因为

$$\frac{\partial u(P)}{\partial t}=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial u(F)}{\partial t}+\frac{\partial u(H)}{\partial t}\right]+O(h^2), \tag{10}$$

$$\frac{\partial u(P)}{\partial x}=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial u(E)}{\partial x}+\frac{\partial u(G)}{\partial x}\right]+O(\tau^2), \tag{11}$$

又因为

$$\frac{\partial u(F)}{\partial t}=\frac{u(C)-u(B)}{\tau}+O(\tau^2),\frac{\partial u(H)}{\partial t}=\frac{u(D)-u(A)}{\tau}+O(\tau^2), \tag{12}$$

$$\frac{\partial u(E)}{\partial x}=\frac{u(B)-u(A)}{h}+O(h^2),\frac{\partial u(G)}{\partial x}=\frac{u(C)-u(D)}{h}+O(h^2), \tag{13}$$

由(9)—(13)，并且忽略高阶无穷小量，得到

$$\frac{1}{2}\left[\frac{u(C)-u(B)}{\tau}+\frac{u(D)-u(A)}{\tau}\right]+\frac{a}{2}\left[\frac{u(B)-u(A)}{h}+\frac{u(C)-u(D)}{h}\right]=f(P),$$

或者

$$\frac{1}{2}\left[\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+\frac{u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^n}{\tau}\right]+\frac{a}{2}\left[\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}+\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right]=f_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \tag{14}$$

此格式称为 Wendroff 格式. 其局部截断误差的精度是 $O(\tau^2+h^2)$. 采用 Fourier 分析方法很容易验证 Wendroff 格式绝对稳定. 下面我们用能量方法证明 Wendroff 格式是绝对稳定的. 考虑齐次方程的差分格式.

首先,将上面的格式(14) 改写为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}-\frac{h}{2\tau}\left[\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right]+\frac{a}{2}\left[\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}+\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right]=0, \tag{15}$$

注意到 $(u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1})-(u_j^n-u_{j-1}^n)=(u_j^{n+1}-u_j^n)-(u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^n)$,

$$u_j^{n+1}-u_j^n=(u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1})-(u_j^n-u_{j-1}^n)+(u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^n),$$

因此

$$\begin{aligned}2(u_j^{n+1}-u_j^n)&=(u_j^{n+1}-u_j^n)+(u_j^{n+1}-u_j^n)\\&=[(u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1})-(u_j^n-u_{j-1}^n)]+[(u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^n)+(u_j^{n+1}-u_j^n)],\end{aligned} \tag{16}$$

在上式(15) 两边同时乘以 $\left[\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right]$ 得到

$$\begin{aligned}&(u_j^{n+1}-u_j^n)\left[\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)-\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)\right]\\&=\frac{h}{2}\left[\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)-\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)\right]^2+\frac{1}{2h}[(u_j^{n+1}-u_j^n)^2-(u_{j-1}^{n+1})^2],\end{aligned} \tag{17}$$

对(15) 两边同时乘以 $\left[\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}-\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right]$,以及(16),整理得

$$\frac{1}{2h\tau}[(u_j^{n+1}-u_j^n)^2-(u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^n)^2]+\left[\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)^2-\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)^2\right]=0,$$

对上式两边同时乘 h,并且对 j 从 1 到 M 求和,则

$$\frac{1}{2\tau}[(u_M^{n+1}-u_M^n)^2-(u_0^{n+1}-u_0^n)^2]+\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)^2-\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)^2=0,$$

又因为边界条件是齐次的,则 $u_0^n=0$. 于是

$$\frac{1}{2}(u_M^{n+1}-u_M^n)^2+\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)^2=\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)^2,$$

因此

$$\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)^2\leqslant\sum_{j=1}^{M}h\left(\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}\right)^2.$$

由此证明了 Wendroff 格式按照能量范数 $\sum_{j=1}^{M} h\left(\frac{u_j^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{h}\right)^2$ 是绝对稳定的.

算例 7:用 Wendroff 格式计算例题 1 的近似解和误差.

当时间步长 $\tau=0.1$,空间步长 $h=0.2$ 时的近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.34 和图 3.35 所示.

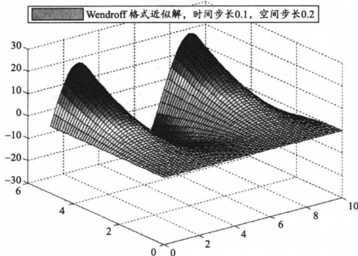


图 3.34　近似解曲面图

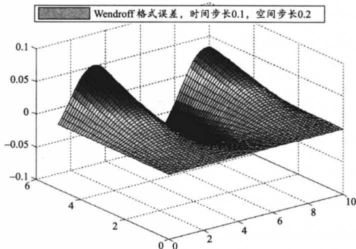


图 3.35　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.0757.

当时间步长 $\tau=0.05$,空间步长 $h=0.08$ 时近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.36 和图 3.37 所示.

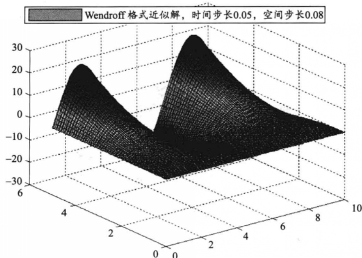


图 3.36　近似解曲面图

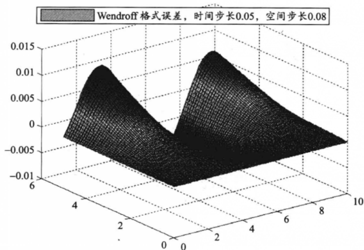


图 3.37　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.0119.

4. 紧格式

类似于抛物型方程，对一阶双曲方程，我们也可以构造紧差分格式.

$$\frac{2}{3}\cdot\frac{u_j^{n+1}-u_j^{n-1}}{2\tau}+\frac{1}{6}\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j+1}^{n-1}+u_{j-1}^{n+1}-u_{j-1}^{n-1}}{2\tau}$$

$$=a\left(\frac{2}{3}\frac{u_{j+1}^{n}-u_{j-1}^{n}}{2h}+\frac{1}{6}\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}+u_{j+1}^{n-1}-u_{j-1}^{n-1}}{2h}\right)$$

或

$$(1-r)u_{j+1}^{n+1}+4u_j^{n+1}+(1+r)u_{j-1}^{n+1}$$

$$=4ru_{j+1}^{n}-4ru_{j-1}^{n}+(1+r)u_{j+1}^{n-1}+4u_j^{n-1}+(1-r)u_{j-1}^{n-1}$$

$$1\leqslant j\leqslant M-1,1\leqslant n\leqslant N-1,$$

可以证明紧格式是绝对稳定的，而且误差精度是 $O(\tau^4+h^4)$.

此差分格式的模板是三层八点格式，如图 3.38.

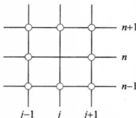


图 3.38

3.5　一阶常系数双曲方程组的差分格式

本节讨论一阶常系数双曲型方程组

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\boldsymbol{A}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x}=0, \tag{18}$$

的差分格式. 其中 $\boldsymbol{U}$ 是 p 维未知函数向量，即 $\boldsymbol{U}=(u_1(x,t),u_2(x,t),\cdots,u_p(x,t))^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{p\times p}$ 为常系数矩阵.

定义　设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为实数，且具有 p 个线性无关的特征向量，则存在可逆阵 $\boldsymbol{S}$ 使得 $\boldsymbol{A}$ 可对角化，即

$$\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\begin{pmatrix}\lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_{p-1} & \\ & & & & \lambda_p\end{pmatrix}=\boldsymbol{\Lambda}.$$

其中 $\lambda_i, i=1,2,\cdots,p$ 为 A 的特征值，则称方程组(18) 是双曲的. 如果 $\boldsymbol{A}$ 是对称的，称为对称双

曲方程组.

将方程组(18) 两边同时左乘矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}$，并且利用恒等式 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{ASS}^{-1}$，则

$$\boldsymbol{S}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{ASS}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} = \boldsymbol{0},$$

令 $\boldsymbol{V} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}$，得到

$$\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{\Lambda}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x} = \boldsymbol{0}, \tag{19}$$

很显然，此方程组(19) 是 p 个分离的方程，也即非耦合方程组. 可以单独对每个方程构造差分格式. 因此，对流方程的差分格式可以推广到方程组. 于是有下面这些差分格式.

1. Lax 格式

$$\frac{\boldsymbol{U}_j^{n+1} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n + \boldsymbol{U}_{j-1}^n)}{\tau} + \boldsymbol{A}\frac{\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n}{2h} = \boldsymbol{0},$$

它的局部截断误差的阶与对流方程一样，都是 $O(\tau + h^2)$.

下面用 Fourier 分析方法讨论稳定性. 令 $\boldsymbol{U}_j^n = \boldsymbol{V}^n \mathrm{e}^{\mathrm{i}wjh}$，代入差分格式，得到传播矩阵

$$\boldsymbol{G}(r) = \cos wh \cdot \boldsymbol{I} - \mathrm{i}r\sin wh \cdot \boldsymbol{A},$$

其中 $\boldsymbol{I}$ 是单位阵，则传播矩阵的特征根是

$$\mu_l = \cos wh - \mathrm{i}r\lambda_l \sin wh, \quad l = 1,2,\cdots,p,$$

则有

$$\begin{aligned} |\mu_l|^2 &= \cos^2 wh + (r\lambda_l \sin wh)^2 \\ &= 1 - (1 - r^2\lambda_l^2)\sin^2 wh, \quad l = 1,2,\cdots,p. \end{aligned} \tag{20}$$

其中 λ_l 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征根.

从(20) 可以看出，要使差分格式稳定，则要求对矩阵的每个特征值 λ_l 满足：$|\lambda_l r| \leqslant 1, l = 1,2,\cdots,p$，成立，即要求 $r\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant 1$ 成立，其中 $\rho(\boldsymbol{A}) = \max\limits_{1\leqslant l\leqslant p}\{|\lambda_l|\}$，称为谱半径. 因此，如果 $r\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant 1$，那么 $\rho(\boldsymbol{G}) \leqslant 1$，即满足 Von Neumann 条件，是稳定的必要条件. 但是，因为双曲型方程组的特性，也就是系数矩阵可以对角化，所以 Von Neumann 条件成了差分格式稳定的充要条件.

2. Lax — Wendroff 格式

类似于构造对流方程的差分格式的办法，把单个对流方程的 Lax—Wendroff 格式推广到对流方程组上. 于是

$$\boldsymbol{U}_j^{n+1} = \boldsymbol{U}_j^n - \frac{1}{2}r\boldsymbol{A}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n) + \frac{1}{2}r^2\boldsymbol{A}^2(\boldsymbol{U}_{j+1}^n - 2\boldsymbol{U}_j^n + \boldsymbol{U}_{j-1}^n),$$

它的误差精度是二阶的，利用 Fourier 分析方法得到传播矩阵

$$G(r) = I - \mathrm{i}r\sin wh\boldsymbol{A} - r^2(1-\cos wh)\boldsymbol{A}^2,$$

则它的特征值为

$$\mu_l(G(r)) = 1 - \mathrm{i}r\sin(wh)\lambda_l - r^2(1-\cos wh)\lambda_l^2,$$

其中 λ_l 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征根.

$$|\mu_l(G(r))|^2 = 1 - 4r^2\lambda_l^2(1-r^2\lambda_l^2)\sin^4\frac{wh}{2}.$$

很显然，要使 $|\mu_l(G(r))|^2 \leqslant 1$，即要 $r\lambda_l \leqslant 1$，也即要求 $r\rho(\boldsymbol{A}) \leqslant 1$ 成立，满足 Von Neumann 条件. 但是，因为双曲型方程组的特性，也就是系数矩阵可以对角化，所以 Von Neumann 条件成了差分格式稳定的充要条件.

3. 迎风格式

假设方程组已经通过线性变换，简化为 p 个独立非耦合的方程组

$$\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{\Lambda}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x} = 0,$$

在对流方程中，对于系数 a，不论 $a>0$ 还是 $a<0$，它的迎风格式都可以统一改写为如下格式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{r}{2}a(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) + \frac{r}{2}|a|(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n),$$

与此类似，方程组(19) 的第 m 个方程的差分格式可以写为

$$v_j^{(m),n+1} = v_j^{(m),n} - \frac{\lambda_m r}{2}(v_{j+1}^{(m),n} - v_j^{(m),n}) + \frac{|\lambda_m| r}{2}[v_{j+1}^{(m),n} - 2v_j^{(m),n} + v_{j-1}^{(m),n}],$$

写成矩阵形式为

$$\boldsymbol{V}_j^{n+1} = \boldsymbol{V}_j^n - \frac{r}{2}\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{V}_{j+1}^n - \boldsymbol{V}_j^n) + \frac{|\boldsymbol{\Lambda}| r}{2}[\boldsymbol{V}_{j+1}^n - 2\boldsymbol{V}_j^n + \boldsymbol{V}_{j-1}^n],$$

其中

$$|\boldsymbol{\Lambda}| = \begin{pmatrix} |\lambda_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_p| \end{pmatrix},$$

则原方程的差分格式为

$$\boldsymbol{U}_j^{n+1} = \boldsymbol{U}_j^n - \frac{r}{2}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n) + \frac{r}{2}|\boldsymbol{A}|(\boldsymbol{U}_{j+1}^n - 2\boldsymbol{U}_j^n + \boldsymbol{U}_{j-1}^n),$$

其中 $|\boldsymbol{A}| = \boldsymbol{S}|\boldsymbol{\Lambda}|\boldsymbol{S}^{-1}$.

利用 Fourier 分析方法得到差分格式的传播矩阵为

$$G(r) = I - r\mathrm{i}\sin wh\cdot\boldsymbol{A} + r(\cos wh - 1)|\boldsymbol{A}|,$$

由矩阵特征值的性质，传播矩阵的特征值为

$$\mu_l = 1 + r|\lambda_l|(\cos wh - 1) - \mathrm{i}r\lambda_l\sin wh,$$

则

$$|\mu_l|^2 = [1 + r|\lambda_l|(\cos wh - 1)]^2 + (r\lambda_l \sin wh)^2$$
$$= 1 - 4r|\lambda_l|(1 - r|\lambda_l|)\sin^2\frac{wh}{2}.$$

要使 $\rho(\boldsymbol{G}) \leqslant 1$,就要 $|\mu_l| \leqslant 1, l = 1,2,\cdots p$,成立,即要 $1 - 4r|\lambda_l|(1 - r|\lambda_l|)\sin^2\frac{wh}{2} \leqslant 1$ 成立. 很显然,当 $r\max\limits_{1\leqslant l\leqslant p}|\lambda_l| \leqslant 1$ 时,$\rho(\boldsymbol{G}) \leqslant 1$ 成立. 因此满足 Von－Neumann 条件. 又因为传播矩阵是可以对角化的,于是 $r\max\limits_{1\leqslant l\leqslant p}|\lambda_l| \leqslant 1$ 是差分格式稳定的充要条件.

4. Wendroff 格式

类似于构造对流方程的差分格式的办法,把单个对流方程的 Wendroff 格式推广到对流方程组上. 格式如下

$$\frac{1}{2}\left[\frac{U_j^{n+1} - U_j^n}{\tau} + \frac{U_{j-1}^{n+1} - U_{j-1}^n}{\tau}\right] + \frac{A}{2}\left[\frac{U_j^n - U_{j-1}^n}{h} + \frac{U_j^{n+1} - U_{j-1}^{n+1}}{h}\right] = f_{j-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}},$$

其局部截断误差的精度是 $O(\tau^2 + h^2)$. 也很容易验证 Wendroff 格式绝对稳定.

5. 蛙跳格式

$$\frac{\boldsymbol{U}_j^{n+1} - \boldsymbol{U}_j^{n-1}}{2\tau} + \boldsymbol{A}\frac{\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n}{2h} = \boldsymbol{0},$$

是一个三层格式,局部截断误差是 $O(\tau^2 + h^2)$,下面讨论它的稳定性.

首先,将方程组化简为非耦合方程组形式 $\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial t} + \boldsymbol{A}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x} = \boldsymbol{0}$,设非偶合方程组的第 m 个方程为

$$\frac{\partial v^{(m)}}{\partial t} + \lambda_m \frac{\partial v^{(m)}}{\partial x} = 0,$$

则其跳蛙格式是

$$\frac{v_j^{(m),n+1} - v_j^{(m),n-1}}{2\tau} + \lambda_m \frac{v_{j+1}^{(m),n} - v_{j-1}^{(m),n}}{2h} = 0, \tag{20}$$

剩下的讨论与对流方程的方法完全相同. 得到的结果是,当 $|\lambda_m|r < 1$,差分格式(20)的传播矩阵有不同的两个特征根,并且,因此满足 Von Neumann 条件,格式稳定. 当 $|\lambda_m|r = 1$,出现和上节的对流方程类似的情况,随着时间层的增加,传播矩阵趋近于无穷大,因此是不稳定的.

3.6 二阶双曲方程的差分格式

线性二阶偏微分方程最基本的形式是波动方程. 在这节中,我们以波动方程为基础讨论二

阶双曲方程的差分格式.

波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, \quad a > 0, \tag{21}$$

根据二阶偏微分方程的理论可知,(21) 相应的特征方程为

$$(\mathrm{d}x)^2 - a^2 (\mathrm{d}t)^2 = 0 \text{ 或者为} \left(\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x}\right)^2 = \frac{1}{a^2},$$

由此得到两个特征方向

$$\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}x} = \pm \frac{1}{a},$$

求解此常微分方程,得到两族直线方程

$$x - at = \xi, \quad x - at = \eta,$$

在研究波动方程的定解问题时,与一阶对流方程一样,特征线起着重要的作用. 例如,利用特征线可以得到波动方程的解析解. 方程的解 $u(x,t)$ 沿特征线的偏导数分别表示为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial t}\right) = a^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} - 2\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2}\right),$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial \xi}\frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta}\frac{\partial \eta}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + 2\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} + \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2},$$

由方程(21) 以及上述两式得到

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} = 0,$$

由此得到波动方程的通解形式如下

$$u(x,t) = f_1(\xi) + g_1(\eta) = f_1(x - at) + g_1(x + at).$$

如果考虑初始条件

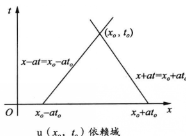
$$u(x,0) = f(x), \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = g(x), \tag{22}$$

则得到方程的特解

$$u(x,t) = \frac{1}{2}[f(x + at) + f(x - at)] + \frac{1}{2a}\int_{x-at}^{x+at} g(\xi) d\xi,$$

此公式称为 d'Alembert 公式.

从 d'Alembert 公式可以看出,初值问题的解在点(x_0,t_0) 的值仅仅依赖于初值函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在区间$[x_0 - at_0, x_0 + at_0]$ 上的值,与区间外的初值无关,所以称区间$[x_0 - at_0, x_0 + at_0]$ 为点(x_0,t_0) 的依赖域. 为了得到点(x_0,t_0) 的依赖域,只需过点(x_0,t_0) 作两条特征线,它们在 x 轴截出的区间就是依赖区域. 两条特征线与 x 轴所围成的区域称为区间(x_0,t_0) 的决定域. 如图 3.39 所示.



$u(x_o, t_o)$ 依赖域

图 3.39

下面介绍几种差分格式

1. 显格式

用中心二阶差商分别代替二阶导数，则在网格点(j,n)处，得到波动方程的差分格式

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}-a^2\,\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=0,$$

此格式的截断误差的阶是$O(\tau^2+h^2)$.

下面考虑初值问题(21)的初始条件(22)的离散化，关于初始条件的离散有很多方法，比如

$$\begin{cases}u_j^0=f_j=f(x_j),\\ \dfrac{u_j^1-u_j^0}{2\tau}=g_j,\end{cases}\tag{23}$$

因为方程本身的截断误差的阶是$O(\tau^2+h^2)$，而初始条件的离散格式(23)的截断误差是$O(\tau+h^2)$，即是一阶的，这样会影响整体的误差. 为了提高精度，使其和内部节点的差分方程的精度相吻合，也可以采用虚拟网格的形式. 具体的作法是，将原网格平行扩充到网格之外，即在原网格周边外各增设一排虚网格点. 例如，在网格点$(j,0)$，$j=1,2,\cdots,N$的下侧增设网格点$(j,-1)$，$j=1,2,\cdots,M$. 然后用中心差商代替初始条件中的一阶微商. 即

$$\begin{cases}u_j^0=f_j=f(x_j),\\ \dfrac{u_j^1-u_j^{-1}}{2\tau}=g_j,\end{cases}\tag{24}$$

此时有$\dfrac{u_j^1-u_j^{-1}}{2\tau}=\left[\dfrac{\partial u}{\partial t}\right]_j^n+O(\tau^2)$，即初始条件的离散差分格式的误差精度就达到$O(\tau^2)$. 因为引入了新的变量$u_j^{-1}(j=1,2,\cdots,M)$，为了消除新引入的未知量，可以假设在初始边界上的点也满足微分方程，即在$n=0$时，构造差分方程

$$\frac{u_j^1-2u_j^0+u_j^{-1}}{\tau^2}-a^2\,\frac{u_{j+1}^0-2u_j^0+u_{j-1}^0}{h^2}=0,\tag{25}$$

然后联立(24)(25) 消除 u_j^{-1},得到

$$u_j^1 = \frac{1}{2}a^2r^2(f_{j-1}+f_{j+1})+(1-a^2r^2)f_j+\tau g_j,$$

于是得到二阶波动方程初始问题的离散差分显格式如下

$$\begin{cases} u_j^{n+1} = a^2r^2(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)+2u_j^n-u_j^{n-1}, \\ u_j^1 = \frac{1}{2}a^2r^2(f_{j-1}+f_{j+1})+(1-a^2r^2)f_j+\tau g_j, \end{cases} \quad n\geqslant 1, \tag{26}$$

因为是显格式,利用初始条件和(26) 可以逐层计算得到各个节点的值.

下面分析显格式的稳定性.为了利用 Fourier 分析方法,首先将波动方程化为等价一阶的双曲方程组的形式.

$$令\ v=\frac{\partial u}{\partial t},\quad \varphi = a\frac{\partial u}{\partial x},$$

则方程(21) 化为

$$\frac{\partial v}{\partial t} = a\frac{\partial \varphi}{\partial x},\quad \frac{\partial \varphi}{\partial t} = a\frac{\partial v}{\partial x}, \tag{27}$$

相应地构造等价方程组的差分格式是

$$\begin{cases} \dfrac{v_j^{n+1}-v_j^n}{\tau} = a\dfrac{\varphi_{j+1/2}^n-\varphi_{j-1/2}^n}{h}, \\ \dfrac{\varphi_{j-1/2}^{n+1}-\varphi_{j-1/2}^n}{\tau} = a\dfrac{v_j^{n+1}-v_{j-1}^{n+1}}{h}, \end{cases} \tag{28}$$

此格式称为 *CFL* 格式.

如果令

$$v_j^n = \frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\tau},\quad \varphi_{j-1/2}^n = a\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{\tau},$$

则 *CFL* 格式等价于显格式.

令 $v_j^n = V_1^n e^{i\omega jh}$, $\varphi_j^n = V_2^n e^{i\omega jh}$,代入格式(28) 得到

$$V_1^{n+1} - 2iar\sin\omega h V_2^n = V_1^n,$$

$$2iar\sin\omega h V_1^n + V_2^{n+1} = V_2^n,$$

写为矩阵形式

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2iar\sin\frac{\omega h}{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_1^{n+1} \\ V_2^{n+1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2iar\sin\frac{\omega h}{2} \\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n\end{pmatrix},$$

于是

$$\begin{pmatrix} V_1^{n+1} \\ V_2^{n+1}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2iar\sin\frac{\omega h}{2} & 1 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 2iar\sin\frac{\omega h}{2} \\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n\end{pmatrix},$$

则 $\begin{pmatrix} V_1^{n+1} \\ V_2^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i}c \\ \mathrm{i}c & 1-c^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n \end{pmatrix}$，其中 $c = 2ar\sin\frac{\omega h}{2}$，

得到传播矩阵为

$$G(r) = \begin{pmatrix} 1 & \mathrm{i}c \\ \mathrm{i}c & 1-c^2 \end{pmatrix}.$$

它的特征方程是 $\lambda^2 - (2-c^2)\lambda + 1 = 0$.

求解特征方程，得到特征根 $\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}[(2-c^2) \pm \mathrm{i}\,|\,c\,|\,\sqrt{4-c^2}]$，

又因为当 $ar \leqslant 1$ 时，$|\,c\,| \leqslant 2$，$|\,2-c^2\,| \leqslant 2 = 1-(-1)$.

由定理得 $|\,\lambda_{1,2}\,| \leqslant 1$，

当 $ar < 1$ 时，于是 $|\,c\,| < 2$，显然有 $\lambda_1 \neq \lambda_2$，即为相异的根，此时 Von Neumann 条件是充要条件，因此，格式是稳定的.

然而当 $ar = 1$ 时，可取 $c = 2$，得到 $\lambda_1 = \lambda_2 = -1$，此时传播矩阵为

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 2\mathrm{i} \\ 2\mathrm{i} & -3 \end{pmatrix}.$$

由线性代数的知识可知，传播矩阵 G 相似于 Jordan 阵，即存在可逆阵 S 使得

$$G = S^{-1}JS,$$

其中 $J = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

由此计算

$$G^2 = S^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ & 1 \end{pmatrix}S, G^3 = S^{-1}\begin{pmatrix} -1 & -3 \\ & -1 \end{pmatrix}S, G^4 = S^{-1}\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ & 1 \end{pmatrix}S,$$

由数学归纳法，计算得到 $G^n = S^{-1}\begin{bmatrix} (-1)^n & (-1)^n n \\ & (-1)^n \end{bmatrix}S$.

因此，当 $n \to \infty$ 时，$\|\,G^n\,\|_\infty \to \infty$. 因此，格式稳定的充要条件是 $ar < 1$.

算例 8：用显格式求波动方程的近似解以及误差

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & 0 < x < 1, \quad 0 < t < 1, \\ u(x,0) = \mathrm{e}^x, & \dfrac{\partial u}{\partial t}(x,0) = -\mathrm{e}^x, \\ u(0,t) = \mathrm{e}^{-t}, & u(1,t) = \mathrm{e}^{1-t}. \end{cases}$$

方程的真解为：$u(x,t) = \mathrm{e}^{x-t}$，它的曲面图如图 3.40 所示

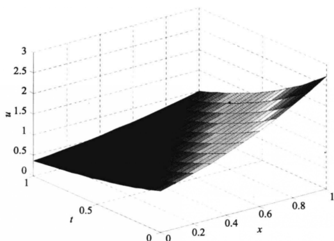


图 3.40　真解曲面图

当空间步长 $h = 0.05$，时间步长 $\tau = 0.04$ 时的近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.41 和图 3.42 所示.

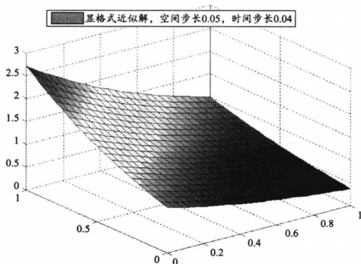


图 3.41　近似解曲面图

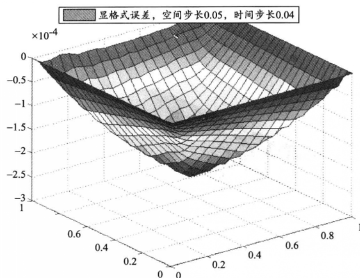


图 3.42　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr $= 2.3509e-004$.

当空间步长 $h=0.01$,时间步长 $\tau=0.01$ 时的近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.43 和图 3.44 所示.

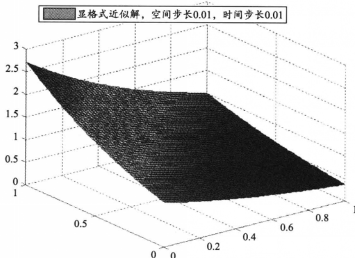


图 3.43　近似解曲面图

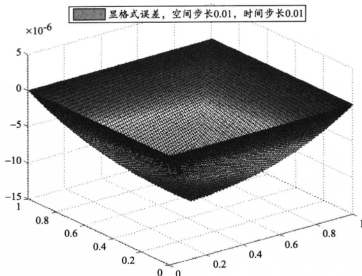


图 3.44　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 1.4319e − 005.

2. 隐格式

考虑方程在节点(x_j,t_n)的取值，有

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j,t_n)-a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_n)=0,$$

因为

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_n)=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{n-1})+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{n+1})\right]-\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\zeta_n),$$

其中 $t_n\leqslant\zeta_n\leqslant t_{n+1}$.

因此

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j,t_n)-\frac{1}{2}a^2\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{n-1})+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j,t_{n+1})\right]=-\frac{(a\tau)^2}{2}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\zeta_n),$$

再利用二阶中心差商与二阶导数之间的关系式，有

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}-\frac{1}{2}a^2\left(\frac{u_{j+1}^{n-1}-2u_j^{n-1}+u_{j-1}^{n-1}}{h^2}+\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2}\right)=R_j^n,$$

其中 R_j^n 是局部截断误差，具体表达式是

$$R_j^n=\tau^2\left[\frac{1}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial t^4}(x_j,\eta_n)-\frac{1}{2}\frac{\partial^4 u}{\partial x^2\partial t^2}(x_j,\zeta_n)\right]-$$

$$h^2\,\frac{a^2}{24}\Big[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_j,t_{n-1})+\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\rho_j,t_{n+1})\Big].$$

忽略高阶无穷小量,得到隐格式

$$u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}-\frac{s^2}{2}(u_{j-1}^{n-1}-2u_j^{n-1}+u_{j+1}^{n-1}+u_{j-1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j+1}^{n+1})=0,$$

其中 $s=ar=a\,\dfrac{\tau}{h}$.

其矩阵形式为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^{n+1}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{U}^{n-1}+2\boldsymbol{U}^n,$$

其中令 $b=1+s^2$,$c=\dfrac{s^2}{2}$,

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} b & -c & & & \\ -c & b & -c & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -c & b & -c \\ & & & -c & b \end{pmatrix}\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix} -b & c & & & \\ c & -b & c & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c & -b & c \\ & & & c & -b \end{pmatrix}$$

算例 9:用隐格式求算例 8 的波动方程的近似解以及误差.

当空间步长 $h=0.05$,时间步长 $\tau=0.04$ 时,近似解曲面图和误差曲面图分别为图 3.45 和图 3.46 所示.

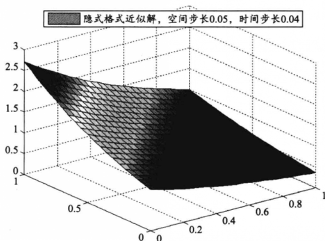


图 3.45　近似解曲面图

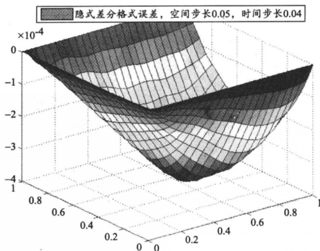


图 3.46　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr $= 3.9432e-004$.

当空间步长 $h=0.01$ 和时间步长 $\tau=0.01$ 时，近似解曲面图和误差曲面图如图 3.47 和图 3.48 所示.

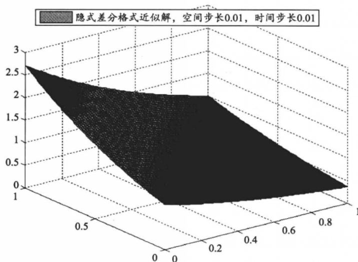


图 3.47　近似解曲面图

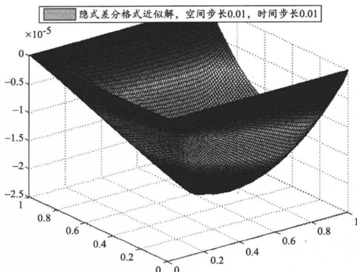


图 3.48　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 2.3631e − 005.

3. 加权格式

为了得到无条件稳定的格式，采用抛物方程构造差分格式的类似技巧，用三层时间的空间二阶中心差商进行加权近似二阶导数$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$，即

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \theta \frac{u_{j+1}^{n-1} - 2u_j^{n-1} + u_{j-1}^{n-1}}{h^2} + (1-2\theta)\frac{u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}}{h^2} + \theta \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2},$$

于是得到

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\tau^2} = a^2\left[\theta \frac{u_{j+1}^{n-1} - 2u_j^{n-1} + u_{j-1}^{n-1}}{h^2} \times (1-2\theta)\frac{u_{j+1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j-1}^{n}}{h^2} + \theta \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{h^2}\right],$$

其中θ是参数. 当$\theta = 0$时，加权格式就是显格式；当$\theta = \frac{1}{2}$时，加权格式就是隐格式. 在实际应用中，一般比较实用的格式是参数$\theta = \frac{1}{4}$.

利用 Taylor 公式很容易得到此格式的局部截断误差是

$$R_j^n(h,\tau)=\left(\frac{\tau^2a^4}{12}-\frac{h^2}{12}-\theta\tau^2a^2\right)\frac{\partial^4u}{\partial x^4}(x_j,t_n)+O(\tau^4+\tau^2h^2+h^4),$$

显然有

$$R_j^n(h,\tau)=\begin{cases}O(\tau^2+h^2), & \theta\neq\frac{1}{12}\left(a^2-\frac{1}{r^2}\right),\\ O(\tau^4+h^4), & \theta=\frac{1}{12}\left(a^2-\frac{1}{r^2}\right).\end{cases}$$

取 $\theta=\frac{1}{4}$，则加权格式是

$$\frac{u_j^{n+1}-2u_j^n+u_j^{n-1}}{\tau^2}=\frac{1}{4}a^2\left(\frac{u_{j+1}^{n-1}-2u_j^{n-1}+u_{j-1}^{n-1}}{h^2}+\right.$$
$$\left.2\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{\tau^2}+\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2}\right).\tag{29}$$

为了讨论此格式的稳定性. 现在对等价一阶方程组(27) 建立如下差分格式

$$\begin{cases}\dfrac{v_j^{n+1}-v_j^n}{\tau}=\dfrac{a}{2h}(\varphi_{j+1/2}^n-\varphi_{j-1/2}^n+\varphi_{j+1/2}^{n+1}-\varphi_{j-1/2}^{n+1}),\\ \dfrac{\varphi_{j-1/2}^{n+1}-\varphi_{j-1/2}^n}{\tau}=\dfrac{a}{2h}(v_j^n-v_{j-1}^n+v_j^{n+1}-v_{j-1}^{n+1}),\end{cases}\tag{30}$$

只要令

$$v_j^n=\frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\tau},\varphi_{j+1/2}^n=\frac{a}{2h}(u_{j+1}^n-u_j^n+u_{j+1}^{n-1}-u_j^{n-1}),$$

容易证明差分格式(29) 与格式(30) 是等价的. 由此，等价方程组得到的差分格式(30) 与二阶双曲方程得到的差分格式(29) 具有相同的稳定性.

利用 Fourier 分析方法得到传播矩阵

$$\boldsymbol{G}(r)=\begin{pmatrix}\dfrac{1-c^2/4}{1+\dfrac{c^2}{4}} & \dfrac{\mathrm{i}c}{1+\dfrac{c^2}{4}}\\ \dfrac{\mathrm{i}c}{1+\dfrac{c^2}{4}} & \dfrac{1-c^2/4}{1+\dfrac{c^2}{4}}\end{pmatrix},\text{其中 } c=2ar\sin\frac{wh}{2},$$

因为 $\boldsymbol{G}^H\boldsymbol{G}=\boldsymbol{I}$，所以传播矩阵 $\boldsymbol{G}(r)$ 为酉矩阵，$\|\boldsymbol{G}(r)\|_0=1$，因此格式(29) 对任何 $ar>0$ 都是稳定的.

或者直接求解传播矩阵的特征值，得

$$\mu_{1,2} = \left[\left(1-\frac{c^2}{4}\right) \pm \mathrm{i}c\right] \Big/ \left(1+\frac{c^2}{4}\right), \quad |\mu|^2 = 1,$$

当 $c \neq 0$ 时，则 $\mu_1 \neq \mu_2$，此时 Von Neumann 条件是格式稳定的充要条件.

当 $c = 0$ 时，则 $\mu_1 = \mu_2 = \left(1-\frac{c^2}{4}\right) \Big/ \left(1+\frac{c^2}{4}\right) = 1$，

则 $\quad \boldsymbol{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{I}.$

因此，格式是稳定的. 综上所述，对于任意的网格比，此格式都是稳定的.

我们还可以证明如下结论，对于加权格式，当 $\theta \geqslant \frac{1}{4}$ 时，它是无条件稳定的，当 $0 \leqslant \theta < \frac{1}{4}$ 时，格式是有条件稳定的，它的充要条件是

$$ar < \frac{1}{\sqrt{1-4\theta}}.$$

算例 10：用加权式求算例的波动方程的近似解以及误差. 当空间步长 $h = 0.05$ 和时间步长 $\tau = 0.04$ 时，近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.49 和图 3.50 所示.

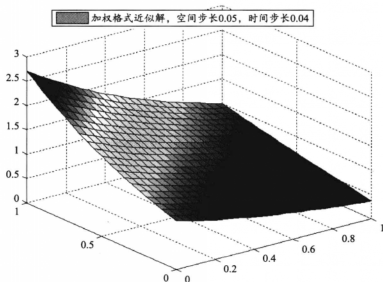


图 3.49　近似解曲面图

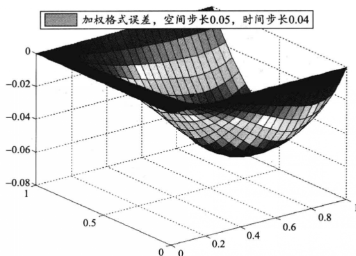


图 3.50　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.0635.

当空间步长 $h = 0.01$ 和时间步长 $\tau = 0.01$ 时,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.51 和图 3.52 所示.

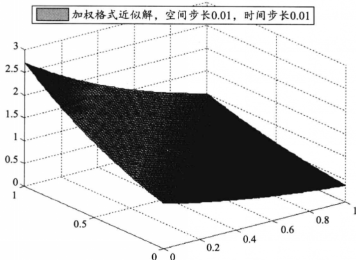


图 3.51　近似解曲面图

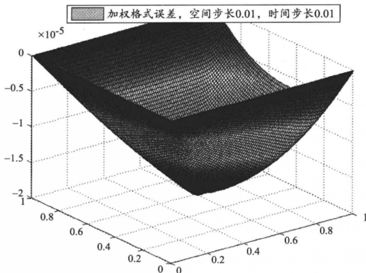


图 3.52 误差曲面图

此时最大误差 MaxErr = 1.8638e − 005

4. 紧格式

类似抛物方程，我们也可以构造二阶波动方程的紧格式.

$$
\begin{aligned}
&2(5+a^2r^2)u_j^{n+1}+(1-a^2r^2)(u_{j+1}^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})\\
&=20(1-a^2r^2)u_j^n+2(1+5a^2r^2)(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)-2(5+a^2r^2)u_j^{n-1}-(1-a^2r^2)(u_{j+1}^{n-1}+u_{j-1}^{n-1})
\end{aligned}
$$

$$1\leqslant i\leqslant M-1,1\leqslant n\leqslant N-1.$$

当非齐次方程时，差分格式右端需要添加项为 $\tau^2(8f_j^n+f_j^{n+1}+f_j^{n-1}+f_{j+1}^n+f_{j-1}^n)$.

可以证明紧差分格式是绝对稳定的，而且误差精度是 $O(\tau^4+h^4)$.
此差分格式的模板是三层九点格式，如图 3.53.

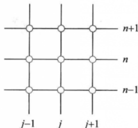


图 3.53 带点结构图

3.7　等价方程组的差分格式

除了上节所介绍的几种与二阶差分方程等价的差分格式外，在本节中，我们再介绍几个等价方程组的差分格式. 当然，在第二节中所介绍的任何方程组的差分格式都可以推广到等价方程组上.

等价方程组矩阵形式为

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}+\boldsymbol{A}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x}=0,$$

其中 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} & -a\\ -a & \end{bmatrix}$，$\boldsymbol{U}=(v,\varphi)^{\mathrm{T}}$.

1. Lax－Friedrichs 格式

$$\frac{\boldsymbol{U}_j^{n+1}-\frac{1}{2}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n+\boldsymbol{U}_{j-1}^n)}{\tau}+\boldsymbol{A}\frac{\boldsymbol{U}_{j+1}^n-\boldsymbol{U}_{j-1}^n}{2h}=\boldsymbol{0},$$

写为方程组的形式为

$$\begin{cases}\dfrac{v_j^{n+1}-\frac{1}{2}(v_{j+1}^n+v_{j-1}^n)}{\tau}-a\dfrac{w_{j+1}^n-w_{j-1}^n}{2h}=0,\\[2ex] \dfrac{w_j^{n+1}-\frac{1}{2}(w_{j+1}^n+w_{j-1}^n)}{\tau}-a\dfrac{v_{j+1}^n-v_{j-1}^n}{2h}=0,\end{cases}$$

利用上一节讨论的结论，它的稳定性条件为 $r\rho(\boldsymbol{A})\leqslant 1$. 而 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\pm a$，因此稳定条件转化为 $ar\leqslant 1$.

2. Lax－Wendroff 格式

$$\boldsymbol{U}_j^{n+1}=\boldsymbol{U}_j^n-\frac{1}{2}r\boldsymbol{A}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n-\boldsymbol{U}_{j-1}^n)+\frac{1}{2}r^2\boldsymbol{A}^2(\boldsymbol{U}_{j+1}^n-\boldsymbol{U}_j^n+\boldsymbol{U}_{j-1}^n),$$

它的方程组形式

$$\begin{cases}v_j^{n+1}=v_j^n+\dfrac{1}{2}ar(w_{j+1}^n-w_{j-1}^n)+\dfrac{1}{2}a^2r^2(w_{j+1}^n-2w_j^n+w_{j-1}^n),\\[2ex] w_j^{n+1}=w_j^n+\dfrac{1}{2}ar(v_{j+1}^n-v_{j-1}^n)+\dfrac{1}{2}a^2r^2(v_{j+1}^n-2v_j^n+v_{j-1}^n),\end{cases}$$

由上一节的讨论可知，它的稳定性条件为 $r\rho(\boldsymbol{A})\leqslant 1$. 而 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\pm a$，因此稳定条件转化

为 $ar \leqslant 1$.

3. 隐格式

对 CFL 格式进行适当修改,得到另外一种差分格式

$$\begin{cases} \dfrac{v_j^{n+1}-v_j^n}{\tau}-a\dfrac{w_{j+\frac{1}{2}}^n-w_{j-\frac{1}{2}}^n+w_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}-w_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{2h}=0, \\ \dfrac{w_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}-w_{j-\frac{1}{2}}^n}{\tau}-a\dfrac{v_j^{n+1}-v_{j-1}^{n+1}+v_j^n-v_{j-1}^n}{2h}=0, \end{cases}$$

此格式是一个隐格式,整理后得

$$\begin{cases} v_j^{n+1}-\dfrac{ar}{2}(w_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}-w_{j-\frac{1}{2}}^{n+1})=v_j^n+\dfrac{ar}{2}(w_{j+\frac{1}{2}}^n-w_{j-\frac{1}{2}}^n), \\ w_{j-\frac{1}{2}}^{n+1}-\dfrac{ar}{2}(v_j^{n+1}-v_{j-1}^{n+1})=w_{j-\frac{1}{2}}^n+\dfrac{ar}{2}(v_j^n-v_{j-1}^n), \end{cases}$$

它的稳定性分析与上节的隐格式的稳定性分析完全相同.

4. Crank－Nicolson 格式

$$\frac{\boldsymbol{U}_j^{n+1}-\boldsymbol{U}_j^n}{\tau}+\frac{A}{2}\left(\frac{\boldsymbol{U}_{j+p}^{n+1}-\boldsymbol{U}_{j-p}^{n+1}}{2hp}+\frac{\boldsymbol{U}_{j+p}^n-\boldsymbol{U}_{j-p}^n}{2hp}\right)=\boldsymbol{0},$$

其中 $p=1$ 或者 $p=\frac{1}{2}$ 是绝对稳定的格式. 下面以 $p=\frac{1}{2}$ 为例分析稳定性,可以得到如下传播矩阵

$$\boldsymbol{G}(r,\tau)=\frac{1}{1+\frac{c^2}{4}}\begin{pmatrix} 1-\frac{c^2}{4} & \mathrm{i}c \\ \mathrm{i}c & 1-\frac{c^2}{4} \end{pmatrix},\quad c=2ar\sin\frac{wh}{2},$$

因为它与第 2 节中的隐格式的传播矩阵完全相同,所以得到的稳定性条件也相同.

算例 11:以例题 8 的二阶波动方程为例,求它的等价方程组 Crank—Nicolson 的近似解.

当空间步长 $h=0.05$ 和时间步长 $\tau=0.04$ 时,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.54 和图 3.55 所示.

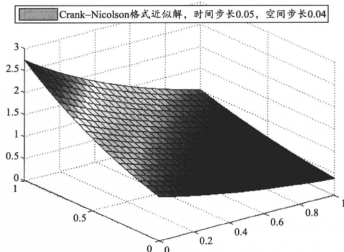


图 3.54　近似解曲面图

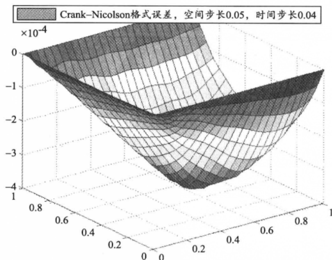


图 3.55　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 3.9432e − 004.

当空间步长 $h = 0.01$ 和时间步长 $\tau = 0.01$ 时，近似解曲面图和误差曲面图分别如图 3.56 和图 3.57 所示.

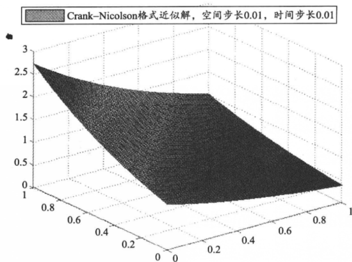


图 3.56　近似曲面图

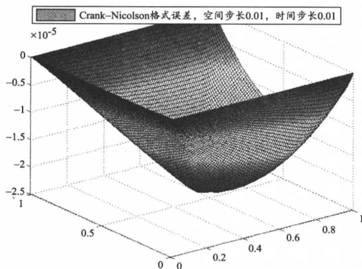


图 3.57　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr $= 2.3631e-005$

3.8　双曲方程(组)的边值问题

本节我们讨论关于双曲方程(组)的初边值问题,在双曲型方程中,边值条件是不能随便给出的,否则,可能出现方程的解不存在甚至相互矛盾.例如,考虑定解区域有界的一阶常系数对流方程,系数 $a>0$,方程的特征线走向是向右的,于是在区域右边的值是由左边的值来确定的.因此,我们只能在微分方程定义域的左边界给出边界条件,不能在右边界给出边界条件,即 $u(0,t)=\varphi(t)$.类似地,当 $a<0$ 时,只能给定右边界的边界条件,即 $u(l,t)=\varphi(t)$.如图 3.58 所示.

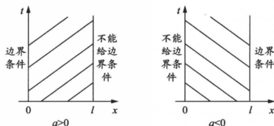


图 3.58

考虑方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad 0\leqslant x\leqslant l,t\geqslant 0,a>0,$$
$$u(x,0)=\varphi(x),\quad 0\leqslant x\leqslant l,$$
$$u(0,t)=\varphi(t),\quad 0\leqslant t\leqslant T.$$

初边值条件的离散为

$$u_j^0=\varphi_j,j=0,1,2,\cdots;\quad u_0^n=\varphi^n,n=1,2,\cdots.$$

显然有 $\varphi_0=\varphi^0$,称为连接性条件.

上面微分方程对应边界的离散格式,对于某些差分格式,已经足够了,只要按照逐层计算,就可以得到网格中每个节点的值.比如迎风格式、Lax 格式等.然而,对于有些差分格式,比如 Lax—Wendroff 格式、Wendroff 格式和蛙跳格式等.除了上述与微分方程对应的边界条件外,都还需要额外的边界条件.因为在计算 u_j^{n+1} 的值时,需要下一层时间节点的值,例如,一般用到 u_{j-1}^n 和 u_{j+1}^n 的值.然而,只有这些节点是内点时,这些节点的值才存在以及有实际意义.比如当方程系数 $a>0$ 时,差分格式不仅需要微分方程左边的边界条件,而且还需要右边的边界条件.这样就需要我们给出额外的边界条件.如何给出呢?一般有两种方法,下面给出详细的讨论.

差分格式与微分方程的边界条件之所以有如此大的区别,是因为微分方程的一部分特征

线指向边界的外部. 由于在特征线上的值恒为常数,可以通过逼近特征线的方程来推导额外的边界条件. 比如,对流方程就可以利用迎风格式来计算 Lax—Wendroff 格式、Wendroff 格式和蛙跳格式等格式的额外的边界条件. 以对流方程说明此方法:

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=0,\qquad x\in(0,l),t>0,$$

当 $a>0$ 时,已知条件中已经给出了左端的边界条件,但是 Lax—Wendroff 格式、Wendroff 格式和蛙跳格式等格式还需要给出右端的边界条件,可以用迎风格式给出右端边界条件,即

$$u_M^{n+1}=u_M^n-ar(u_M^n-u_{M-1}^n),$$

当 $a<0$ 时,需要额外给出左端的边界条件,用迎风格式给出左端边界条件为

$$u_0^{n+1}=u_0^n-ar(u_1^n-u_0^n).$$

对于对流双曲方程组的情况,特征线的方法需要知道方程组系数矩阵的全部特征值和特征向量. 然后将方程组化为非耦合的独立方程组,然后再利用上面的方法得到额外的边界条件参见图 3.59.

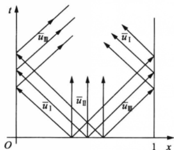


图 3.59

第 2 种方法是选择边界条件尽量使差分格式具有与微分方程相似的守恒性质. 我们不妨以 $a<0$ 为例进行说明.

取积分区域 $D=\{(x,t)\mid 0\leqslant x\leqslant h,n\tau\leqslant t\leqslant(n+1)\tau\}$,即为左端边界区域的边界上的单元. 对微分方程两边在区域 D 进行积分

$$\iint_D\left(\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial t}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t=0,$$

于是得到 $\int_0^h[u(x,t_{n+1})-u(x,t_n)]\mathrm{d}x+a\int_{t_n}^{t_{n+1}}[u(h,t)-u(0,t)]\mathrm{d}t=0.$

对上面的积分方程利用数值积分作近似,比如,利用梯形积分公式得到

$$\frac{(u_1^{n+1}-u_1^n)+(u_0^{n+1}-u_0^n)}{2}h+a\frac{(u_1^{n+1}-u_0^{n+1})+(u_1^n-u_0^n)}{2}\tau=0,$$

整理得到

$$u_0^{n+1}=\frac{1}{1-ar}[(1+ar)(u_0^n-u_1^{n+1})+(1-ar)u_1^n].$$

当然采用不同的数值积分得到不同的格式.

3.9　高维双曲型方程(组)

在前面的章节中,已经讨论了空间一维的双曲问题的差分格式,在形式上和原则上都可以推广到高维. 相比抛物方程来说,它的推广要容易一些. 在双曲问题中,一般很少使用隐格式求解,因为显格式求解就能达到比较好的结果,对稳定性的条件要求并不高. 尽管如此,但是一维问题的差分格式推广到高维问题,还存在许多问题. 比如,一维问题某些特定格式的一些很好的性质常常不能推广到高维. 利用隐格式时,所得到的代数方程组,求解起来很麻烦等等诸多的问题.

1. 二维一阶双曲型方程

考虑方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+b\frac{\partial u}{\partial y}=0,$$

首先对空间区域进行网格剖分,为了方便,不妨设 x 方向和 y 方向是等步长的,即 $\Delta x=\Delta y=h$.

(1) Lax 格式

$$u_{j,m}^{n+1}-\frac{1}{4}(u_{j,m+1}^n+u_{j,m-1}^n+u_{j+1,m}^n+u_{j-1,m}^n)+a\tau\frac{u_{j+1,m}^n-u_{j-1,m}^n}{2h}+b\tau\frac{u_{j,m+1}^n-u_{j,m-1}^n}{2h}=0,$$

此格式的局部截断误差的阶是 $O(\tau+h^2)$.

下面分析它的稳定性. 令 $u_{j,m}^n=v^n e^{i(w_1jh+w_2mh)}$,代入上述差分格式,得到

$$v^{n+1}=\left[\frac{1}{2}(\cos w_1h+\cos w_2h)-ir(a\sin w_1h+b\sin w_2h)\right]v^n,$$

$$G(r)=\frac{1}{2}(\cos w_1h+\cos w_2h)-ir(a\sin w_1h+b\sin w_2h),$$

$$\begin{aligned}|G|^2&=\frac{1}{4}(\cos w_1h+\cos w_2h)^2+r^2(a\sin w_1h+b\sin w_2h)^2\\&=1-(\sin^2w_1h+\sin^2w_2h)\left[\frac{1}{2}-r^2(a^2+b^2)\right]-\\&\quad\frac{1}{4}(\cos w_1h-\cos w_2h)^2-r^2(a\sin w_1h-b\sin w_2h)^2\\&\leqslant 1-(\sin^2w_1h+\sin^2w_2h)\left[\frac{1}{2}-r^2(a^2+b^2)\right],\end{aligned}$$

要使格式稳定,必须有 $|G|\leqslant 1$,即 $r^2(a^2+b^2)\leqslant\frac{1}{2}$,得到 $\sqrt{(a^2+b^2)}\,r\leqslant\frac{1}{\sqrt{2}}$. 所以格式的稳定性条件是 $\sqrt{(a^2+b^2)}\,r\leqslant\frac{1}{\sqrt{2}}$.

(2) Lax — Wendroff 格式

设 $u(x,y,t)$ 是 $\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}+b\frac{\partial u}{\partial y}=0$ 的解,那么

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}&=\frac{\partial}{\partial t}\left(-a\frac{\partial u}{\partial x}-b\frac{\partial u}{\partial y}\right)=-a\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)-b\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)\\&=a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2ab\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+b^2\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}.\end{aligned}$$

又由 Taylor 展开,有

$$\begin{aligned}u(x_j,y_m,t+\tau)=&\,u(x_j,y_m,t_n)-\tau\left(a\frac{\partial}{\partial x}+b\frac{\partial}{\partial y}\right)u(x_j,y_m,t_n)+\\&\frac{\tau^2}{2}\left(a^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+2ab\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}+b^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x_j,y_m,t_n)+O(\tau^3),\end{aligned}$$

分别用一阶中心差商和二阶中心差商代替一阶导数和二阶导数就得到格式

$$\begin{aligned}u_{j,m}^{n+1}=&\,u_{j,m}^n-\frac{r}{2}(a\delta_0^x u_{j,m}^n+b\delta_0^y u_{j,m}^n)+\\&\frac{1}{2}(r^2\,a^2\delta_+^x\,\delta_-^x\,u_{j,m}^n+2ab\,\delta_0^x\delta_0^y u_{j,m}^n+b^2\delta_+^y\,\delta_-^y\,u_{j,m}^n),\end{aligned}$$

其中

$\delta_0^x u_{j,m}^n=u_{j+1,m}^n-u_{j-1,m}^n$, $\quad\delta_+^x\,u_{j,m}^n=u_{j+1,m}^n-u_{j,m}^n$,

$\delta_-^x\,u_{j,m}^n=u_{j,m}^n-u_{j-1,m}^n$, $\quad\delta_0^y,\delta_+^y,\delta_-^y$ 可以类似的定义.

和一维一样,它的局部截断误差是 $O(\tau^2+h^2)$. 类似Lax格式用Fourier分析方法得到格式的稳定性条件是 $\sqrt{(a^2+b^2)}\,r\leqslant\frac{1}{\sqrt{2}}$.

(3) 分数步长法

从上面两个推广的格式可以看出,简单的推广会影响到稳定性条件. 下面给出一个广泛应用的两步格式.

第一步:当讨论在 x 方向的差分时,时间上的差分从 t_n 到 $t_n+\frac{\tau}{2}$;

第二步:当讨论在 y 方向的差分时,时间上的差分从 $t_n+\frac{\tau}{2}$ 到 t_{n+1}.

具体格式如下

$$\begin{cases}u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}=u_{j,m}^n+\tau D_1 u_{j,m}^n,\\u_{j,m}^{n+1}=u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}}+\tau D_2 u_{j,m}^{n+\frac{1}{2}},\end{cases}$$

其中 D_1, D_2 分别是关于 x, y 方向的差分算子.

例如：以 Lax－Wendroff 格式来完成二步法：

$$D_1 = -a \cdot \frac{1}{2h}\delta_0^x + \frac{\tau}{2}a^2 \cdot \frac{1}{h^2}\delta_+^x\delta_-^x,$$

$$D_2 = -b \cdot \frac{1}{2h}\delta_0^y + \frac{\tau}{2}b^2 \cdot \frac{1}{h^2}\delta_+^y\delta_-^y,$$

通过计算可以得到两步法的稳定性条件是

$$|a|r < 1, |b|r < 1.$$

2. 二维一阶双曲型方程组

定义：如果对任意实数 $\alpha, \beta, \alpha + \beta = 1$，存在可逆阵 $\boldsymbol{S}$ 使得

$$\boldsymbol{S}(\alpha\boldsymbol{A} + \beta\boldsymbol{B})\boldsymbol{S}^{-1} = \boldsymbol{\Lambda},$$

成立，其中 Λ 是实对角阵. 则称下面方程组

$$\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t} + \boldsymbol{A}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} + \boldsymbol{B}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial y} = \boldsymbol{0}$$

为双曲方程组.

(1) Lax－Wendroff

利用多元 Taylor 展开，有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{U}(x,y,t+\tau) &= \boldsymbol{U}(x,y,t) + \tau\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial t}(x,y,t) + \frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial t^2}(x,y,t) + O(\tau^3) \\ &= \boldsymbol{U}(x,y,t) - \tau\left(\boldsymbol{A}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial x} + \boldsymbol{B}\frac{\partial \boldsymbol{U}}{\partial y}\right) + \\ &\quad \frac{\tau^2}{2}\left[\boldsymbol{A}^2\frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial x^2} + (\boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA})\frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial x \partial y} + \boldsymbol{B}^2\frac{\partial^2 \boldsymbol{U}}{\partial y^2}\right] + O(\tau^3), \end{aligned}$$

上式中各阶导数用相应的各阶中心差商近似，得到如下格式

$$\begin{aligned} \boldsymbol{U}_{j,m}^{n+1} = L_h\boldsymbol{U}_{j,m}^n = [\boldsymbol{I} - \frac{1}{2}r(\boldsymbol{A}\delta_0^x + \boldsymbol{B}\delta_0^y) + \\ \frac{1}{2}r^2(\boldsymbol{A}^2\delta_+^x\delta_-^x + \boldsymbol{B}^2\delta_+^y\delta_-^y) + \frac{1}{2}r^2(\boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA})\delta_0^x\delta_0^y]\boldsymbol{U}_{j,m}^n, \end{aligned}$$

其中 L_h 称为差分算子，具体形式是

$$L_h = \boldsymbol{I} - \frac{1}{2}r(\boldsymbol{A}\delta_0^x + \boldsymbol{B}\delta_0^y) + \frac{1}{2}r^2(\boldsymbol{A}^2\delta_+^x\delta_-^x + \boldsymbol{B}^2\delta_+^y\delta_-^y) + \frac{1}{2}r^2(\boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA})\delta_0^x\delta_0^y.$$

利用 Fourier 方法可讨论上式的稳定性：

令 $\boldsymbol{U}_{j,m}^n = \boldsymbol{V}^n e^{i(w_1 jh + w_2 mh)}$ 代入差分格式得到其传播矩阵

$$\begin{aligned} \boldsymbol{G}(r) = \boldsymbol{I} + ir(\boldsymbol{A}\sin w_1 h + \boldsymbol{B}\sin w_2 h) + r^2[\boldsymbol{A}^2(\cos w_1 h - 1) + \\ \boldsymbol{B}^2(\cos w_2 h - 1)] - \frac{1}{2}r^2(\boldsymbol{AB} + \boldsymbol{BA})\sin w_1 h \sin w_2 h. \end{aligned}$$

如果 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是对称阵，可以证明 Lax—Wendroff 格式的稳定性条件是：

$$r\rho(\boldsymbol{A})\leqslant\frac{1}{2\sqrt{2}},r\rho(\boldsymbol{B})\leqslant\frac{1}{2\sqrt{2}}.$$

从上面的讨论可知，与一维稳定性条件的比较可知，二维的稳定性条件要严格许多，一般随着空间维数的增高，稳定性条件越来越苛刻.

(2) Strang 可裂格式

$$\boldsymbol{U}_{ij}^{k+1}=L_h(\tau)\boldsymbol{U}_{ij}^{k}.$$

$L_h(\tau)$ 的定义如下：

$$L_h(\tau)=L_h^x(\frac{\tau}{2})L_h^y(\tau)L_h^x(\frac{\tau}{2}),$$

$$L_h^x(\tau)=\boldsymbol{I}-\frac{r}{2}\boldsymbol{A}(T_x-T_x^{-1})+\frac{1}{2}r^2\boldsymbol{A}^2(T_x-2\boldsymbol{I}+T_x^{-1}),$$

$$L_h^y(\tau)=\boldsymbol{I}-\frac{r}{2}\boldsymbol{B}(T_y-T_y^{-1})+\frac{1}{2}r^2\boldsymbol{B}^2(T_y-2\boldsymbol{I}+T_y^{-1}),$$

其中 T 表示移位算子，T_x,T_y 表示在 x,y 方向的移位算子，即 $T_xu(x)=u(x+h),T_x^{-1}u(x)=u(x-h)$，$T_y$ 也是类似地定义.

从上面的定义可以看出，$L_h^x(\tau)$ 是沿 x 方向的一维 Lax—Wendroff 格式. $L_h^y(\tau)$ 是沿 y 方向的一维 Lax—Wendroff 格式. 尽管从形式上看，差分格式变得很复杂了，但是它带来很大的好处，最重要的就是对稳定性条件的放宽. 因为 $L_h^x(\frac{\tau}{2})$ 的稳定条件是 $r\rho(\boldsymbol{A})\leqslant 2$，$L_h^y(\tau)$ 的稳定性条件是 $r\rho(\boldsymbol{B})\leqslant 1$. 因此，Strang 可裂格式的稳定性条件是 $r\rho(\boldsymbol{A})\leqslant 2$ 和 $r\rho(\boldsymbol{B})\leqslant 1$.

3. 二维波动方程的差分格式

高维方程组的差分格式均可以推广到二维波动方程的等价方程组，在本小节中不做任何介绍，下面仅介绍前面章节中不曾出现的格式.

考虑方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-a^2(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=0,\quad a>0,$$

(1) 显格式

$$\frac{1}{\tau^2}\delta_t^2u_{j,m}^n=\frac{1}{h^2}(\delta_x^2u_{j,m}^n+\delta_y^2u_{j,m}^n),$$

局部截断误差是 $O(\tau^2+h^2)$. 若用 Fourier 分析方法分析显格式的稳定性，通过把它化为等价的双层方程组，可以得到稳定的必要条件是 $ar\leqslant\frac{1}{\sqrt{2}}$，而稳定的充要条件是 $ar<\frac{1}{\sqrt{2}}$.

(2) 交替方向隐格式

① ADI 格式(Ⅰ)

$$\begin{cases} \dfrac{u_{jm}^{n+1/2}-2u_{jm}^{n}+u_{jm}^{n-1}}{\tau^2}=\dfrac{a^2}{h^2}\big[\delta_x^2(\theta u_{jm}^{n+1/2}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})+ \\ \qquad\qquad \delta_y^2(2\theta u_{jm}^{n-1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n})\big], \\ \dfrac{u_{jm}^{n+1}-u_{jm}^{n+1/2}}{\tau^2}=\dfrac{a^2}{h^2}\delta_x^2(\theta u_{jm}^{n+1}-\theta u_{jm}^{n-1}), \end{cases}$$

其中 $0\leqslant\theta\leqslant 1$，通过上面两式消除 $u_{jm}^{n+1/2}$，得到

$$\frac{\delta_t^2 u_{jm}^n}{\tau^2}=\frac{a^2}{h^2}\big[\delta_x^2(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})+$$

$$\delta_y^2(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})\big]-\frac{\tau^2\theta^2}{h^4}\delta_x^2\delta_y^2(u_{jm}^{n+1}-u_{jm}^{n-1}),$$

忽略最后一项，就得到二维问题的加权格式

$$\frac{\delta_t^2 u_{jm}^n}{\tau^2}=\frac{a^2}{h^2}\big[\delta_x^2(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})+\delta_y^2(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})\big].$$

算例 12：考虑如下二维波动方程，请用 ADI 格式 I 求二维波动方程的近似解.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}=-2, & 0<x,y<1,t>0 \\ u\,|_{t=0}=x^2+y^2 & 0<x,y<1 \\ u\mid x=1=1+t^2+y^2,u\mid y=1=1+t^2+x^2, & 0<x,y<1 \end{cases}$$

对权参数 θ，我们取 $\theta=\dfrac{1}{4}$.

当时间 $t=1$ 时，真解的曲面图如图 3.60 所示.

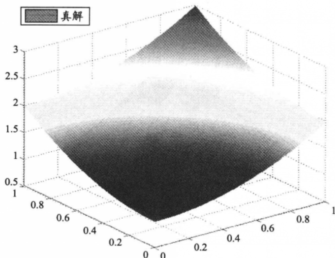


图 3.60　真解曲面图

当取空间步长 $h=0.1$，时间步长 $\tau=0.1$ 时，不同时刻的近似解曲面图和误差曲面图如图 3.61 ～ 图 3.64 所示.

时间取 0.8 时的近似解

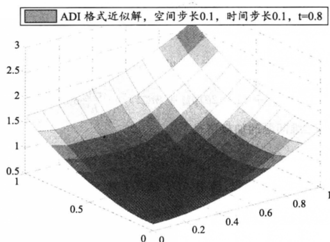


图 3.61　近似解曲面图

时间取 0.8 时的误差

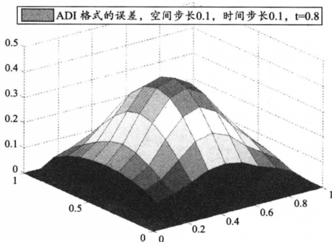


图 3.62　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.4050.

时间取 0.9 时的近似解

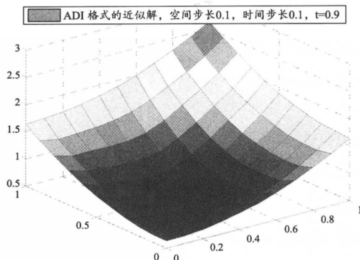


图 3.63　近似解曲面图

时间取 0.9 时的误差

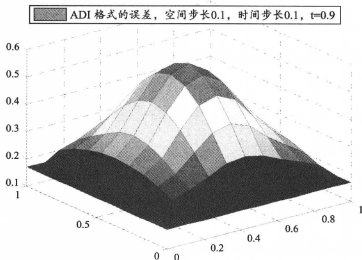


图 3.64　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr $=0.5750$.

当取空间步长 $h=0.05$,时间步长 $\tau=0.05$ 时,不同时刻的近似解曲面图和误差曲面图如图

时间取 0.8 时的近似解

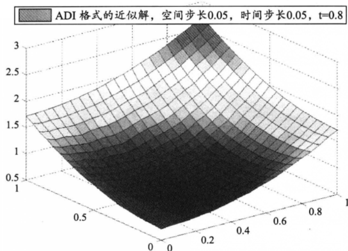


图 3.65 近似解曲面图

时间取 0.8 时的误差

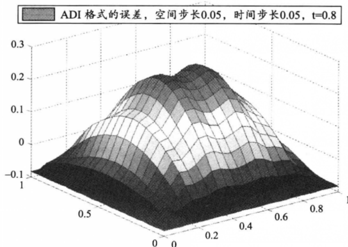


图 3.66 误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.2516.

时间取 0.9 时的近似解

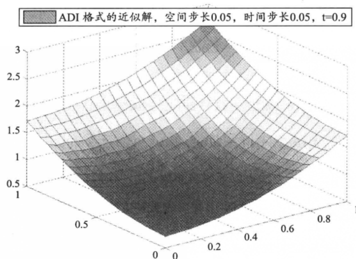


图 3.67　近似解曲面图

时间取 0.9 时的误差

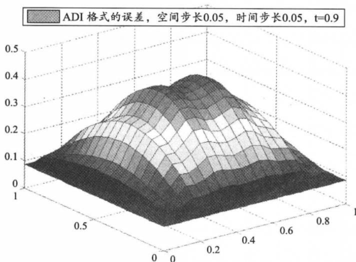


图 3.68　误差曲面图

此时的最大误差为 MaxErr = 0.4216.

② *ADI* 格式(Ⅱ)

$$\begin{cases}\dfrac{u_{jm}^{n+1/2}-2u_{jm}^{n}+u_{jm}^{n-1}}{\tau^{2}}=\dfrac{a^{2}}{h^{2}}[\delta_{x}^{2}(\theta u_{jm}^{n+1/2}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})+\delta_{y}^{2}u_{jm}^{n}],\\ \dfrac{\delta_{t}^{2}u_{jm}^{n}}{\tau^{2}}=\dfrac{a^{2}}{h^{2}}[\delta_{x}^{2}(\theta(u_{jm}^{n+1/2}+u_{jm}^{n-1})+(1-2\theta)u_{jm}^{n})+\delta_{y}^{2}(\theta(u_{jm}^{n-1}+u_{jm}^{n+1})+(1-2\theta)u_{jm}^{n})].\end{cases}$$

它也是二维问题的加权格式的变形，上面两式消除 $u_{jm}^{n+1/2}$，得到

$$\frac{\delta_{t}^{2}u_{jm}^{n}}{\tau^{2}}=\frac{a^{2}}{h^{2}}[\delta_{x}^{2}(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})+\delta_{y}^{2}(\theta u_{jm}^{n+1}+(1-2\theta)u_{jm}^{n}+\theta u_{jm}^{n-1})]-\frac{\tau^{2}\theta^{2}}{h^{4}}\delta_{x}^{2}\delta_{y}^{2}\delta_{t}^{2}u_{jm}^{n}.$$

这两种格式利用 Fourier 分析方法可以证明当参数 $\theta\geqslant\frac{1}{4}$ 时，它们都是无条件稳定的.

算例 13：请用 ADI 格式 2 求解算例 12 中二维波动方程的近似解。

不同步长的近似解曲面图和误差图如图 3.69

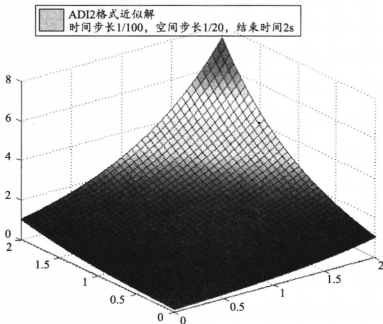


图 3.69　近似解曲面图

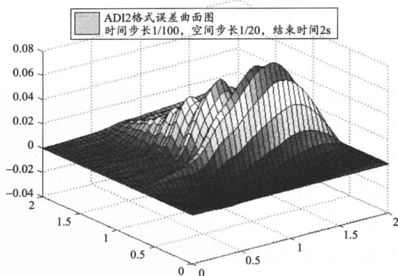


图 3.70　误差曲面图

此时的最大误差值为 0.0751.

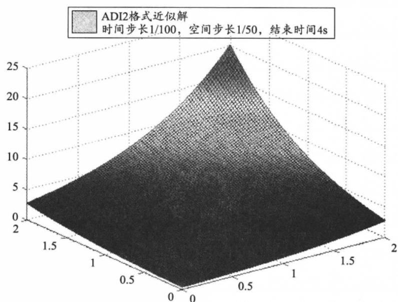


图 3.71　近似解曲面图

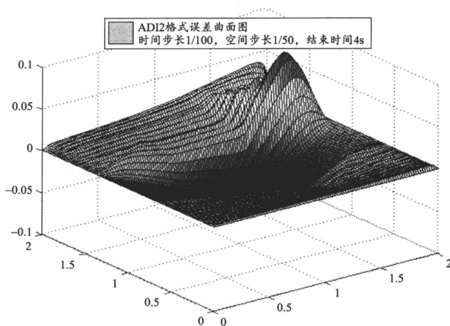


图 3.72　误差曲面图

此时的最大误差值为 0.0861.

3.10　变系数双曲型方程的差分格式

1. 一阶变系数对流方程的差分格式

考虑变系数方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a(x,t)\frac{\partial u}{\partial x}=0,\quad x\in(-\infty,+\infty)$$

其中 $a(x,t)$ 是一次可微函数.

变系数对流方程和常系数对流方程一样，也有特征线，在同一条特征线上，$u(x,t)$ 是固定常数. 不同的是，此时的特征线是曲线，不是常系数的直线. 特征线函数 $x(t)$ 满足如下方程

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=a(x,t),$$

特征线如图 3.73 所示

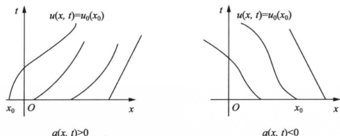


图 3.73　特征曲线族

将常系数的 Lax 格式推广到变系数方程，得到

$$\frac{u_j^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)}{\tau}+a_j^n\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=0,$$

局部截断误差是 $O(\tau+h^2)$.

由于系数是变的，稳定性的分析就无法直接采用 Fourier 分析方法，下面采用能量法讨论稳定性.

将 Lax 格式改写为

$$u_j^{n+1}=\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)-\frac{1}{2}a_j^n r(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n),$$

对上式两端同时乘以 u_j^{n+1}，得到

$$\begin{aligned}(u_j^{n+1})^2&=\frac{1}{2}(u_{j+1}^n+u_{j-1}^n)u_j^{n+1}-\frac{1}{2}a_j^n r(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)u_j^{n+1}\\&=\frac{1}{2}(1+a_j^n r)u_{j-1}^n u_j^{n+1}+\frac{1}{2}(1-a_j^n r)u_{j+1}^n u_j^{n+1},\end{aligned}$$

如果假设 $\max\limits_j|a_j^n|r\leqslant 1$，由重要不等式 $2ab\leqslant a^2+b^2$，从而有

$$\begin{aligned}(u_j^{n+1})^2&\leqslant\frac{1}{4}(1+a_j^n r)[(u_{j-1}^n)^2+(u_j^{n+1})^2]+\frac{1}{4}(1-a_j^n r)[(u_j^{n+1})^2+(u_{j+1}^n)^2]\\&=\frac{1}{4}(1+a_j^n r)(u_{j-1}^n)^2+\frac{1}{2}(u_j^{n+1})^2+\frac{1}{4}(1-a_j^n r)(u_{j+1}^n)^2\\&\leqslant\frac{1}{2}[(u_{j-1}^n)^2+(u_{j+1}^n)^2]+\frac{1}{2}a_j^n r[(u_{j-1}^n)^2-(u_{j+1}^n)^2].\end{aligned}$$

根据前面章节离散范数的定义 $\|u^n\|_h^2=\sum\limits_{-\infty}^{\infty}(u_j^n)^2h$，

那么有

$$\| u^{n+1} \|_h^2 \leqslant \| u^n \|_h^2 + \frac{1}{2} \sum a_j^n r((u_{j-1}^n)^2 - (u_{j+1}^n)^2)$$

$$= \| u^n \|_h^2 + \frac{1}{2} \sum (a_{j+1}^n - a_{j-1}^n)(u_j^n)^2 h,$$

在此先假设 $\left|\frac{\partial a}{\partial x}\right| \leqslant M, x \in \mathbf{R}, t \in [0,T]$,

由中值定理有 $| a_{j+1}^n - a_{j-1}^n | \leqslant 2Mh$.

于是可得

$$\| u^{n+1} \|_h^2 \leqslant (1+M\tau) \| u^n \|_h^2 \leqslant (1+M\tau)^2 \| u^{n-1} \|_h^2 \leqslant \cdots$$

$$\leqslant (1+M\tau)^{n+1} \| u^0 \|_h^2.$$

因此 $\| u^{n+1} \|_h^2 \leqslant e^{MT} \| u^0 \|_h^2, n\tau \leqslant T$.

于是得到稳定性条件是 $\max\limits_j | a_j^n | r \leqslant 1$.

前面章节中对常系数齐次方程所建立的格式,都可以推广到变系数齐次方程,并且都能用能量方法进行稳定性分析.对于非齐次方程,除了 Lax—Wendroff 和 Wendroff 不能推广到变系数非齐次方程外,其余的都能推广.

用能量方法讨论差分格式的稳定性是很严格的并且有很高技巧的方法.然而在实际应用中,大多采用的还是以 Fourier 分析方法为基础的"冻结系数"法.此方法就是把差分格式中的变系数在某一点固定看成常数,然后用 Fourier 分析方法.

2. 变系数方程组

考虑方程组

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{A}(x,t)\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{0},$$

其中 $\mathbf{U}(x,t)$ 是 p 维向量函数,$\mathbf{A}(x,t)$ 是 $p \times p$ 方阵,方阵的每个元素都是光滑函数,且对于矩阵 $\mathbf{A}(x,t)$,存在可逆矩阵 $\mathbf{S}(x,t)$ 使得

$$\boldsymbol{\Lambda} = \mathbf{S}^{-1}(x,t)\mathbf{A}(x,t)\mathbf{S}(x,t) = \begin{pmatrix} \lambda_1(x,t) & & & \\ & \lambda_2(x,t) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_p(x,t) \end{pmatrix}.$$

在本节,关于变系数方程组,我们仅介绍几种基本的方法,也是常系数方程组的推广.

(1) 迎风格式

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{1}{2} r \mathbf{A}_j^n (\mathbf{U}_{j+1}^n - \mathbf{U}_{j-1}^n) + \frac{1}{2} r |\mathbf{A}_j^n| (\mathbf{U}_{j+1}^n - 2\mathbf{U}_j^n + \mathbf{U}_{j-1}^n).$$

其中 $|\boldsymbol{A}_j^n| = \boldsymbol{S}_j^n |\boldsymbol{\Lambda}_j^n| \boldsymbol{S}_j^{n-1}, \boldsymbol{S}_j^n = \boldsymbol{S}(x_j, t_n)$.

$$|\boldsymbol{\Lambda}_j^n| = \begin{pmatrix} |\lambda_{j1}^n| & & \\ & \ddots & \\ & & |\lambda_{jp}^n| \end{pmatrix},$$

它的截断误差的阶是 $O(\tau + h^2)$.

(2) Lax 格式

$$\frac{\boldsymbol{U}_j^{n+1} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{U}_{j+1}^n + \boldsymbol{U}_{j-1}^n)}{\tau} + \boldsymbol{A}_j^n \frac{\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n}{2h} = \boldsymbol{0},$$

它的截断误差的阶是 $O(\tau + h^2)$.

(3) Lax－Wendroff 格式

$$\boldsymbol{U}_j^{n+1} = \boldsymbol{U}_j^n - \frac{1}{2} r\boldsymbol{A}_j^n (\boldsymbol{U}_{j+1}^n - \boldsymbol{U}_{j-1}^n) + \frac{1}{2}(r\boldsymbol{A}_j^n)^2 (\boldsymbol{U}_{j+1}^n - 2\boldsymbol{U}_j^n + \boldsymbol{U}_{j-1}^n),$$

它的截断误差的阶是 $O(\tau^2 + h^2)$.

采用冷冻冻结系数法,可以得到上面三种格式的稳定性条件

$$r \max_j \rho(\boldsymbol{A}_j^n) \leqslant 1.$$

3. 变系数波动方程

考虑二阶变系数线性波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x}\left(a(x) \frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0,$$

其中 $0 < C_0 \leqslant a(x) \leqslant C_1$.

对上述方程建立加权格式

$$\frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\tau^2} = \Delta_x^+ [\theta a_j \Delta_{\bar{x}} u_j^{n-1} + (1 - 2\theta) a_j \Delta_{\bar{x}} u_j^n + \theta a_j \Delta_{\bar{x}} u_j^{n+1}],$$

其中

$$\Delta_x^+ u_j = \frac{u_{j+1} - u_j}{h}, \quad \Delta_{\bar{x}} u_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{h},$$

通过能量法可以证明,当 $0 \leqslant \theta < \frac{1}{4}$ 时,加权格式是条件稳定的. 当 $\frac{1}{4} \leqslant \theta \leqslant 1$ 时,是无条件稳定的.

习 题

1. 试分析对流方程的差分格式$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+a\,\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{2h}=0$的稳定性。

2. 试分析对流方程的差分格式

$$\frac{u_j^{k+1}-u_j^k}{\tau}+\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j+1}^k}{\tau}+a\left(\frac{u_{j+1}^{k+1}-u_{j-1}^{k+1}}{2h}+\frac{u_{j+1}^k-u_{j-1}^k}{2h}\right)=0$$

的局部截断误差和稳定性。

3. 讨论一维波动方程的差分格式

$$\frac{u_j^{k+1}-2u_j^k+u_j^{k-1}}{\tau^2}=a^2\left(\frac{u_{j+1}^{k+1}-2u_j^{k+1}+u_{j-1}^{k+1}}{4h^2}+\frac{u_{j+1}^k-2u_j^k+u_{j-1}^k}{2h^2}+\frac{u_{j+1}^{k-1}-2u_j^{k-1}+u_{j-1}^{k-1}}{4h^2}\right)$$

的局部截断误差和稳定性。

4. 讨论二维一阶双曲方程$\frac{\partial u}{\partial t}+a\,\frac{\partial u}{\partial x}+b\,\frac{\partial u}{\partial y}=0$的差分格式

$$\frac{u_{ij}^{k+1}-u_{ij}^k}{\tau}+a\,\frac{u_{i+1,j}^{k+1}-u_{i-,j}^{k+1}}{2h}+b\,\frac{u_{i,j+1}^{k+1}-u_{i-,j-1}^{k+1}}{2h}=0$$

的局部截断误差和稳定性。

上机练习

用差分格式计算下面的定解问题。

1. $$\begin{cases}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=a^2\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t>0,0<x<2\pi,\\ u(x,0)=0,\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)=\sin x,\\ u(0,t)=u(2\pi,t),t>0.\end{cases}$$

2. $$\begin{cases}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}-\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=(t^2-x^2)\sin(xt), & 1>t>0,\ 0<x<1.\\ u(x,0)=0,\frac{\partial u}{\partial t}(x,0)=x, & 0<x<1,\text{精确解 } u(x,t)=\sin(xt).\\ u(0,t)=0,u(1,t)=\sin t,1\geqslant t>0,\end{cases}$$

3. $\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, 0 < x < 1 \\ u(x,0) = 0, \dfrac{\partial u}{\partial t}(x,0) = -\mathrm{e}^x, & \text{精确解 } u(x,t) = \mathrm{e}^{x-t}. \\ u(0,t) = \mathrm{e}^{-t}, u(1,t) = \mathrm{e}^{1-t}, t > 0, \end{cases}$

4. $\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, 0 < x < 2\pi \\ u(x,0) = 0, u(1,t) = 0, \\ u(0,t) = \sin(2k+1)\pi x, t > 0. \end{cases}$

5. $\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, 0 < x < 2\pi, \\ u(x,0) = 0, \dfrac{\partial u}{\partial t}(x,0) = \sin(2k+1)\pi x, \\ u(0,t) = 0, u(1,t) = 0, t > 0. \end{cases}$

6. $\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, & t > 0, 0 < x < 2\pi, \\ u(x,0) = \begin{cases} x, x \in [0, \frac{1}{2}], \\ 1 - x, x \in [\frac{1}{2}, 1], \end{cases} \\ u(0,t) = 0, u(1,t) = 0, t > 0. \end{cases}$

要求：计算一些节点的值，画出精确解的曲面图，分别取 $h = \dfrac{1}{50}, \tau = \dfrac{1}{100}; h = \dfrac{1}{100}, \tau = \dfrac{1}{200}$ 所得到数值解的曲面图；画出误差的曲面图.

第 4 章　对流扩散方程的差分格式

对流和扩散现象大量地出现在自然界及各个工程领域中，应用广泛，其具体的表现形式多种多样. 从放液体漏斗上的热传递到水渗入土壤的过程，从多孔渗水介质的散布到可溶物在河口和近海的扩散，从污染物在浅湖的蔓延到河床对化学药品的吸收，从可溶物在流动液体中的溶解到污染物质在大气中的远程传播等，这些输运过程，无不都与对流和扩散过程密切相关. 而各种生产电力的方法几乎都是以对流扩散作为其基本过程的. 甚至在金融领域，对流扩散的思想在进行期权或股票定价上也有很大的应用，比如 *Black* − *Scholes* 期权定价公式. 所有这些的对流和扩散过程的数学模型可以归结为下面的对流扩散方程

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},x\in\mathbf{R},t>0,$$

其中 a 是对流系数，v 是扩散系数.

在前面的章节中，已经讨论过对流方程和扩散方程的差分格式，两者相互结合就可以得到对流扩散方程的差分格式.

4.1　几种差分格式

1. 中心差分格式

时间导数用向前差商、空间导数用中心差商来逼近，那么就得到了一种差分格式.

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=v\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2},\tag{1}$$

由 Taylor 展开易知，差分格式(1) 的局部截断误差为$\frac{1}{2}a^2\tau\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+O(\tau^2+h^2)$.

利用方程$\frac{\partial u}{\partial t}=-a\frac{\partial u}{\partial x}+v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$并对它两边同时对 t 求导可得

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=v^2\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}-2av\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}+a^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

$$\frac{\partial^3 u}{\partial t^3}=v^3\frac{\partial^6 u}{\partial x^6}-3av^2\frac{\partial^5 u}{\partial x^5}+3a^2v\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}-a^3\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}.$$

下面来分析差分格式的稳定性，将差分格式改写为

$$u_j^{n+1}=u_j^n-\frac{1}{2}r_1(u_{j+1}^n-u_{j-1}^n)+r_2(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n),$$

其中　$r_1 = a\tau / h, r_2 = v\tau / h^2$，是两层格式，采用 Fourier 分析方法很容易计算出传播因子

$$G(r_1, r_2) = 1 - 2r_2(1 - \cos wh) - \mathrm{i} r_1 \sin wh,$$

$$|G(r_1, r_2)^2| = r_1^2 \sin^2 wh + 1 + 4r_2{}^2(1 - \cos wh)^2 - 4r_1(1 - \cos wh)$$
$$= 1 - (1 - \cos wh)[4r_2 - 4r_2{}^2(1 - \cos wh) - r_1{}^2(1 + \cos wh)].$$

要使 $|G| \leqslant 1$，只要 $4r_2 - 4r_2{}^2(1 - \cos wh) - r_1{}^2(1 + \cos wh) \geqslant 0$，

即有 $4r_2 - 2r_1{}^2 - (4r_2{}^2 - r_1{}^2)(1 - \cos wh) \geqslant 0$，

因为 $\frac{1 - \cos wh}{2} \in [0,1]$，于是 $4r_2 - 2r_1{}^2 \geqslant 0$，$4r_2 - 2r_1{}^2 + 2(r_1{}^2 - 4r_2{}^2) \geqslant 0$.

将 r_1, r_2 代入得到

$$\tau \leqslant \frac{2v}{a^2}, \quad \tau \leqslant \frac{h^2}{2v}$$

由此得到中心显式格式的稳定性条件为

$$\tau \leqslant \frac{2v}{a^2}, \quad v\frac{\tau}{h^2} \leqslant \frac{1}{2}.$$

算例 1：用中心格式求下面方程的近似解

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial u}{\partial x} = 0.001 \times \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, 0 < t < 1, 0 < x < 1, \\ u(x,0) = \mathrm{e}^x, \\ u(0,t) = \mathrm{e}^{-4999t}, u(1,t) = \mathrm{e}^{1-4999t}. \end{cases}$$

真解为 $u(x,t) = \mathrm{e}^{x-4999t}$. 真解曲面图、近似解曲面图和误差曲面图分别如图 4.1、图 4.2、图 4.3 所示.

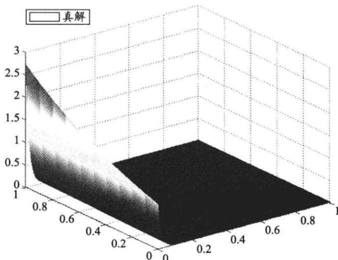


图 4.1　真解的曲面图

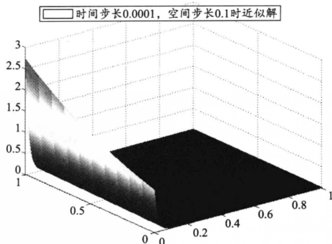


图 4.2　中心差分格式的近似解曲面图

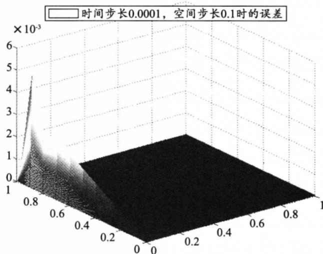


图 4.3　中心差分格式的误差曲面图

2. 修正中心显格式

根据上节的局部截断误差可以得到，当时间步长 τ 不趋近于 0 时，可知中心显格式实际与如下对流扩散方程相容

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\,\frac{\partial u}{\partial x}=\left(v-\frac{\tau}{2}a^{2}\right)\frac{\partial^{2}u}{\partial x^{2}}.$$

所以中心显格式在实际应用中,减少了扩散效应.为了弥补被减少扩散效应的损失,在构造差分格式的时候,采取一些补救措施,增强扩散效应,使差分格式更容易稳定.因此,在原对流扩散方程基础上适当地增大扩散系数,将在中心显差分格式中损失的扩散系数增加到微分方程的扩散项中,即

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=\left(v+\frac{\tau}{2}a^2\right)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{2}$$

然后再给出方程(2)的中心显格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=\left(v+\frac{\tau}{2}a^2\right)\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2},$$

此格式称为修正中心格式.

下面讨论修正格式的稳定性,由于中心显格式和修正格式在形式上完全一样,唯一的区别在于修正格式的扩散系数是 $v+\frac{\tau}{2}a^2$,因此,稳定性条件的表达式只要用 $v+\frac{\tau}{2}a^2$ 代替 v 就得到稳定性的条件,

$$\tau\leqslant\frac{2}{a^2}\left(v+\frac{\tau}{2}a^2\right),\quad \left(v+\frac{\tau}{2}a^2\right)\frac{\tau}{h^2}\leqslant\frac{1}{2}.$$

第一个条件显然是恒成立的,所以修正显格式的稳定条件是 $\left(v+\frac{\tau}{2}a^2\right)\frac{\tau}{h^2}\leqslant\frac{1}{2}$.

算例 2:考虑算例 1 的方程.用修正中心差分格式求近似解,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 4.4 和图 4.5 所示:

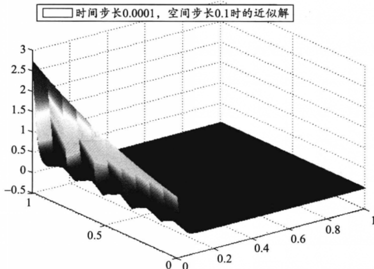


图 4.4　修正中心显式格式近似解曲面图

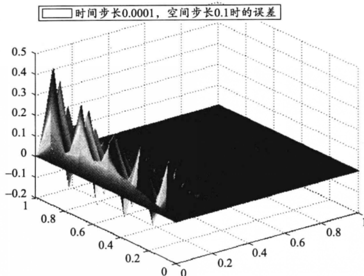


图 4.5　修正中心格式误差曲面图

3. 迎风格式

在对流占优的扩散方程中，扩散系数 v 在很多情况下会很小，甚至接近于 0. 此时，从中心显格式的第一个稳定性条件 $\tau\leqslant\dfrac{2v}{a^2}$ 可知，时间步长必须很小才满足稳定性的要求. 为了避免这样的情况发生，可以通过降低空间的截断误差的阶作为代价，得到相对宽松的稳定性条件. 对流项用一阶向前(向后) 差分来逼近，就得到差分格式.

当 $a>0$ 时，　$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}=v\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2},$$

当 $a<0$ 时，　$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_j^n}{h}=v\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}.$$

很显然，此时局部截断误差是 $O(\tau+h)$.

下面以 $a>0$ 为例说明迎风格式的稳定性.

首先，我们将迎风格式改写为

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}=\left(v+\frac{ah}{2}\right)\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2},$$

再次利用中心显格式的稳定性条件，可以得到迎风格式的稳定性条件

$$\tau \leqslant \frac{2}{a^2}\left(v+\frac{1}{2}ah\right),\left(v+\frac{1}{2}ah\right)\frac{\tau}{h^2} \leqslant \frac{1}{2}.$$

因为

$$\left(v+\frac{1}{2}ah\right)\frac{\tau}{h^2} \leqslant \frac{1}{2} \Rightarrow \tau \leqslant \frac{h^2}{2\left(v+\frac{1}{2}ah\right)} \leqslant \frac{h^2}{2\left(v+\frac{1}{2}ah\right)} \times \frac{4\left(v+\frac{1}{2}ah\right)^2}{a^2h^2}$$

$$= \frac{2}{a^2}\left(v+\frac{1}{2}ah\right),$$

因此，第一个条件能被第二个条件推出，所以稳定性条件是$\left(v+\frac{1}{2}ah\right)\frac{\tau}{h^2} \leqslant \frac{1}{2}$.

算例 3：考虑例 1 的对流扩散方程. 用迎风差分格式求近似解. 近似解曲面图和误差曲面图分别如图 4.6、图 4.7 和图 4.8 所示：

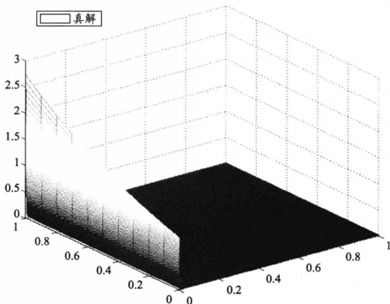


图 4.6　真解的曲面图

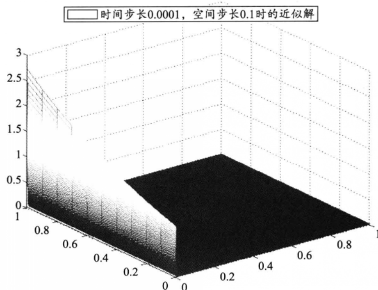


图 4.7　迎风格式差分格式近似解的曲面图

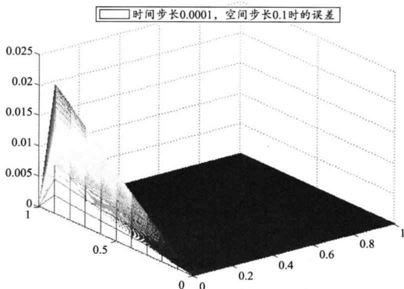


图 4.8　迎风格式的误差曲面图

4. Samarskii 格式

在迎风格式中为了得到宽松的稳定性条件,我们是以牺牲局部截断误差的精度作为代价的. 为此,提高精度,把迎风格式进行修正. 类似于从中心显格式得到修正中心显格式,调整扩散项的系数. 通过调整扩散项系数,使差分格式的空间截断误差达到二阶. 可以对原对流扩散方程中的扩散项增加一个小的扰动,即

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}=(1+\varepsilon)v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{3}$$

ε 为扰动系数,并且当 $h\to 0$ 时,$\varepsilon\to 0$.

不妨假设对流系数 $a>0$ 为例说明此格式. 对(3) 构造迎风格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+a\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}=(1+\varepsilon)v\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2},$$

为了使空间截断误差达到二阶,扰动系数 ε 必须满足一定的条件,下面求 ε.

利用 Taylor 展开公式有

$$a\frac{u_j^n-u_{j-1}^n}{h}=a\frac{\partial u}{\partial x}\Big|_j-\frac{ah}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j+O(h^2),$$

$$\begin{aligned}(1+\varepsilon)v\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}&=(1+\varepsilon)v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j+O(h^2)\\&=v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j+\varepsilon v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j+O(h^2),\end{aligned}$$

为了达到二阶精度,必须令

$$-\frac{ah}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j=\varepsilon v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\Big|_j,$$

因此,可得

$$\varepsilon=-\frac{ah}{2v}.$$

由迎风格式的稳定性条件推导出此格式的稳定性条件为

$$\left(1-\frac{ah}{2v}\right)\frac{\tau}{h^2}\leqslant\frac{1}{2}.$$

算例 4:考虑例 1 中的对流扩散方程. 用 Samarskii 差分格式求近似解,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 4.9 和图 4.10 所示:

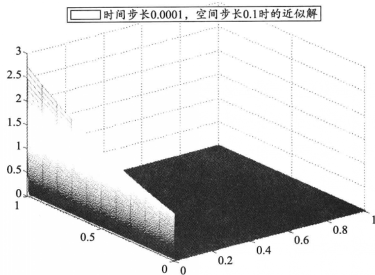


图 4.9　Samarskii 差分格式近似解曲面图

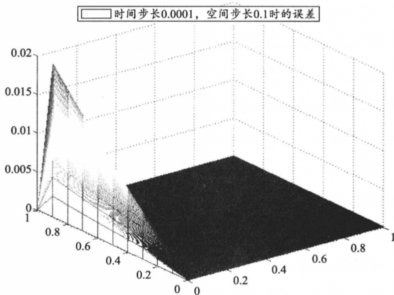


图 4.10　Samarskii 差分格式误差曲面图

5. Crank－Nicolson 格式

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\tau}+\frac{2}{a}\left(\frac{u_{j+1}^n-u_{j-1}^n}{2h}+\frac{u_{j+1}^{n+1}-u_{j-1}^{n+1}}{2h}\right)$$
$$=\frac{v}{2}\left(\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}+\frac{u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1}}{h^2}\right),$$

局部截断误差很显然是 $O(\tau^2+h^2)$. 下面分析稳定性

利用 Fourier 分析方法得到传播因子

$$G=\frac{(1-\mu+\mu\cos wh)-\mathrm{i}\,\frac{r}{2}\sin wh}{(1+\mu-\mu\cos wh)+\mathrm{i}\,\frac{r}{2}\sin wh}=\frac{(1-2\mu\sin^2\frac{wh}{2})-\mathrm{i}\,\frac{r}{2}\sin wh}{(1+2\mu\sin^2\frac{wh}{2})+\mathrm{i}\,\frac{r}{2}\sin wh},$$

其中 $r=\frac{a\tau}{h},\mu=\frac{v\tau}{h^2}$,

$$|G|^2=\frac{(1-2\mu\sin^2\frac{wh}{2})^2+\frac{r^2}{4}\sin^2 wh}{(1+2\mu\sin^2\frac{wh}{2})^2+\frac{r^2}{4}\sin^2 wh}\leqslant 1.$$

所以 Crank－Nicolson 格式无条件稳定.

算例 5:方程同中心差分格式. 用 Crank－Nicolson 差分格式求近似解,近似解曲面图和误差曲面图分别如图 4.11 和图 4.12 所示:

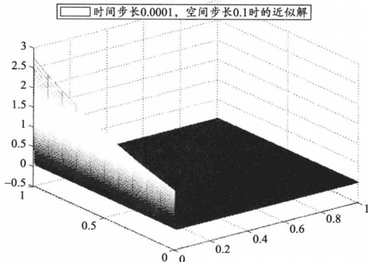


图 4.11　Crank－Nicolson 差分格式近似解的曲面图

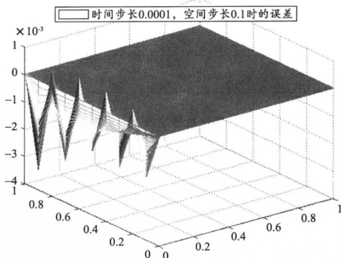


图 4.12 Crank－Nicolson 差分格式误差曲面图

4.2 特征差分方法

然而在力学、物理和工程应用领域，经常会遇到对流项系数远远大于扩散项系数的情况. 从方程分类来看，对流扩散方程属于抛物方程或者椭圆方程，但是当对流项系数远远大于扩散项系数时，它又体现出双曲方程的基本特点. 因此，需要构造精度高、稳定性好、适用于小扩散系数，在本质上能反映双曲方程的特征形式的差分格式. 特征差分方法正是这一类方法.

考虑方程

$$c\frac{\partial u}{\partial t}+b\frac{\partial u}{\partial x}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t), \tag{4}$$

其中 $c>0, a>0, |b|>a$，都是常数.

令 $P^2=b^2+c^2$，与算子 $c\frac{\partial u}{\partial t}+b\frac{\partial u}{\partial x}$ 相伴随的特征方向是

$$\lambda=(\frac{b}{P},\frac{c}{P}).$$

于是沿 λ 的方向导数为

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}=\frac{c}{P}\frac{\partial}{\partial t}+\frac{b}{P}\frac{\partial}{\partial x},$$

于是对流扩散方程(4) 可化为形式

$$P\frac{\partial u}{\partial\lambda}-a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=f(x,t), \tag{5}$$

设点 $A(x,t_n)$ 是区域内一点，l 是过点 A 的特征方向的直线，直线 l 与直线 $t=t_{n-1}$ 的交点 $B(\bar{x},t_{n-1})$，如图 4.13 所示，

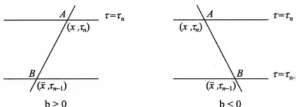


图 4.13　特征线

则
$$\bar{x}=x-\frac{b}{c}\tau. \tag{6}$$

则特征方向导数的近似值可以如下表示
$$P\frac{\partial u}{\partial\lambda}\approx P\frac{u(x,t_n)-u(\bar{x},t_{n-1})}{\sqrt{(x-\bar{x})^2+\tau^2}}=c\times\frac{u(x,t_n)-u(\bar{x},t_{n-1})}{\tau}, \tag{7}$$

又因为
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}+O(h^2), \tag{8}$$

于是，令 $x=x_j$，将上面两式(7)(8) 代入(5)，并忽略无穷小量，得到特征差分格式
$$c\times\frac{u(x_j,t_n)-u(\bar{x},t_{n-1})}{\tau}-a\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=f_j^n. \tag{9}$$

1. 线性插值的特征差分格式

因为点 $B(\bar{x},t_{n-1})$ 一般不是网格节点，于是 $u(\bar{x},t_{n-1})$ 是无法直接求出来的，只能做近似，一般采取插值近似.

如果 $u(\bar{x},t_{n-1})$ 是以 $\{x_j\}$ 为插值节点，以 $\{u_j^{n-1}\}$ 为插值数据构造的分段线性(或者二次)插值函数，则称(9) 为基于插值的特征差分格式.

首先，为了论述简单方便，我们假设 $\frac{c}{|b|}\geqslant\frac{\tau}{h}$，于是根据公式(6)，得到 $\bar{x}\in[x_{j-1},x_j]$ 或者 $\bar{x}\in[x_j,x_{j+1}]$，不妨假设 $\bar{x}\in[x_{j-1},x_j]$ 成立，因此 $u(\bar{x},t_{n-1})$ 是$[x_{j-1},x_j]$ 上插值数据 u_{j-1}^{n-1}，u_j^{n-1} 构成的线性插值函数. 则
$$u(\bar{x},t_{n-1})\approx u_{j-1}^{n-1}\frac{x_j-\bar{x}}{h}+u_j^{n-1}\frac{\bar{x}-x_{j-1}}{h}, \tag{10}$$

其中
$$\bar{x}=x_j-\frac{b}{c}\tau, \tag{11}$$

把(10)(11) 代入(9) 得到一阶线性插值的特征差分方法

$$c\frac{u_j^n-u_j^{n-1}}{\tau}+b\frac{u_j^{n-1}-u_{j-1}^{n-1}}{h}-a\frac{u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n}{h^2}=f_j^n,$$

如果此前的假设$\frac{c}{|b|}\geqslant\frac{\tau}{h}$不成立，则$\bar{x}\notin[x_{j-1},x_j]\cup[x_j,x_{j+1}]$. 令

$$i(j)=\{i:|x_{i(j)}-\bar{x}|=\min_m|x_m-\bar{x}|\},$$

则$\bar{x}\in[x_{i(j)-1},x_{i(j)}]$或者$\bar{x}\in[x_{i(j)},x_{i(j)+1}]$. 于是$u(\bar{x},t_{n-1})$是$[x_{i(j)-1},x_{i(j)}]$（或者$[x_{i(j)},x_{i(j)+1}]$）上插值数据$u_{i(j)-1}^{n-1},u_{i(j)}^{n-1}$（或者$u_{i(j)}^{n-1},u_{i(j)+1}^{n-1}$）构成的线性插值函数. 不妨假设$b>0$，得到插值区间是$[x_{i(j)-1},x_{i(j)}]$.

则
$$\bar{x}=x_{i(j)}-\frac{b}{c}\tau,\tag{12}$$

进行线性插值得到

$$u(\bar{x},t_{n-1})\approx u_{i(j)-1}^{n-1}\frac{x_{i(j)}-\bar{x}}{h}+u_{i(j)}^{n-1}\frac{\bar{x}-x_{i(j)-1}}{h},\tag{13}$$

把(12)(13)代入(9)得到此种情形的线性特征差分格式.

此种格式的局部截断误差的阶是$O(\tau+h)$. 也可以通过能量方法得到线性插值的特征差分格式的整体误差也是$O(\tau+h)$. 详细的过程不在本书中讨论.

2. 基于二次插值的特征差分格式

设τ充分小，使得$\bar{x}\in[x_{j-1},x_{j+1}]$，于是在子区间$[x_{j-1},x_{j+1}]$上讨论二次插值，插值节点是$x_{j-1},x_j,x_{j+1}$，插值数据是$u_{j-1}^{n-1},u_j^{n-1},u_{j+1}^{n-1}$. 设$l_{j-1},l_j,l_{j+1}$分别是三个节点的 Lagrange 插值基函数，则

$$l_{j-1}(x)=-\frac{1}{h^2}(x-x_j)(x-x_{j+1}),$$

$$l_j(x)=\frac{1}{2h^2}(x-x_{j-1})(x-x_{j+1}),$$

$$l_{j-1}(x)=-\frac{1}{h^2}(x-x_{j-1})(x-x_j).$$

于是，二次插值函数

$$L(x,t_{n-1})=u_{j-1}^{n-1}l_{j-1}(x)+u_j^{n-1}l_j(x)+u_{j+1}^{n-1}l_{j+1}(x),\tag{14}$$

令$\alpha=-\frac{b\tau}{ch}$，则有　$\bar{x}=x_j-\alpha h$，

$$l_{j-1}(\bar{x})=-\frac{1}{h^2}(\bar{x}-x_{j-1})(\bar{x}-x_{j+1})=-\frac{1}{2}(1-\alpha)\alpha,$$

$$l_j(\bar{x})=\frac{1}{2h^2}(\bar{x}-x_j)(\bar{x}-x_{j+1})=(1-\alpha)(1+\alpha),$$

$$l_{j-1}(\bar{x}) = -\frac{1}{h^2}(\bar{x} - x_{j-1})(\bar{x} - x_j) = \frac{1}{2}(1+\alpha)\alpha.$$

把上面三式代入(14),得到

$$L(x, t_{n-1}) = \frac{\alpha^2(u_{j-1}^{n-1} + u_{j+1}^{n-1})}{2} + (1-\alpha^2)u_j^{n-1} + \frac{\alpha^2(u_{j+1}^{n-1} - u_{j-1}^{n-1})}{2}.$$

用插值函数值 $L(\bar{x}, t_{n-1})$ 作为 $u(\bar{x}, t_{n-1})$ 的近似值,即 $u(\bar{x}, t_{n-1}) = L(\bar{x}, t_{n-1})$. 因此得到二次插值的特征差分格式.

通过能量分析法得到此格式的整体截断误差是 $O(\tau + h^2)$.

第5章　椭圆方程差分格式

5.1　椭圆方程的差分格式

考虑二维 Poisson 方程和 Laplace 方程

$$-\Delta u=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=f(x,y),\qquad (x,y\in\Omega)$$

和

$$-(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2})=0,\qquad (x,y\in\Omega)$$

其中Ω是$x-y$平面的有界区域，其边界是由分段的光滑曲线段组成的. 为了简单起见，先考虑取Ω为矩形区域

$$\Omega=\{(x,y)\mid 0<x<a,0<y<b\},$$

则其边界是四条直线段.

对Ω剖分网格如下. 将区间$[0,a]$和$[0,b]$分别N和M等分，则x轴方向的步长$h_1=\frac{a}{N}$，y轴方向的步长$h_2=\frac{b}{M}$，记$x_i=ih_1,y_i=ih_2$，用两组平行线$x=x_i$和$y=y_j$将矩形划分为小矩形，那么Ω网格剖分的点为

$$\Omega_h=\{(x_i,y_j)\mid 0\leqslant i\leqslant N,0\leqslant j\leqslant M\}.$$

Ω内部的网格点为

$$\overset{o}{\Omega}_h=\{(x_i,y_j)\mid 1\leqslant i\leqslant N-1,1\leqslant j\leqslant M-1\}.$$

边界节点的集合为$\partial\Omega_h=\Omega_h\setminus\overset{o}{\Omega}_h$，如图 5.1 所示.

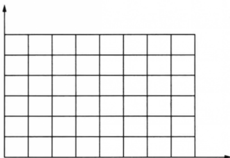


图 5.1　矩形网格剖分

1. 五点差分格式

对于 Poisson 方程，考虑在内部节点的取值，即

$$\left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right]_{ij}+\left[\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right]_{ij}=[f(x,y)]_{ij},$$

分别对 x,y 方向用 Taylor 公式有

$$\frac{1}{h_1^2}(u_{i+1,j}-2u_{ij}+u_{i-1,j})=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_{ij}+\frac{h_1^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i,y_j),$$

$$\frac{1}{h_2^2}(u_{i,j+1}-2u_{ij}+u_{i,j-1})=\left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)_{ij}+\frac{h_2^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x_i,\eta_j)=f_{ij},$$

上面两式相加，并且忽略高阶无穷小量，得到五点格式：

$$\frac{u_{i+1,j}-2u_{ij}+u_{i-1,j}}{h_1^2}+\frac{u_{i,j+1}-2u_{ij}+u_{i,j-1}}{h_2^2}=f_{ij}.$$

局部截断误差为

$$R_{ij}=\frac{h_1^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i,y_j)+\frac{h_2^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}(x_i,\eta_j).$$

算例 1：考虑用五点差分格式求方程的近似解，

$$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=-6(x+y), & 0<x<1,\quad 0<y<1,\\ u(x,0)=x^3,\quad u(x,1)=1+x^3, & 0\leqslant x\leqslant 1,\\ u(0,y)=y^3,\quad u(1,y)=1+y^3, & 0\leqslant y\leqslant 1.\end{cases}$$

偏微分方程的精确解为：$u(x,y)=x^3+y^3$，其曲面图如图 5.2 所示，近似解的曲面图和误差的曲面图分别如图 5.3 和图 5.4 所示.

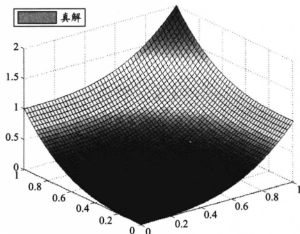


图 5.2　真解曲面图

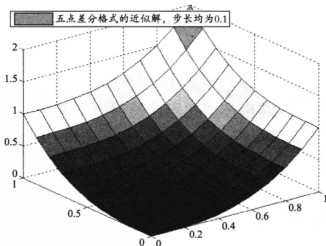


图 5.3　近似解曲面图

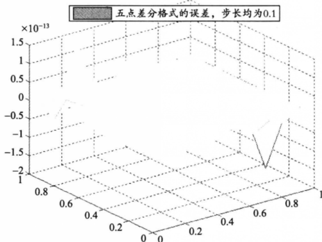


图 5.4　误差曲面图

2. 九点格式

为推导简单起见，我们令 $h_1 = h_2 = h$，节点及标号图 5.5，

令 $\xi = h\dfrac{\partial}{\partial x}, \eta = h\dfrac{\partial}{\partial y}, D^2 = \dfrac{\partial^2}{\partial x \partial y}$，那么通过简单的微分运算得到

$$\xi^2 + \eta^2 = h^2 \Delta, \quad \xi\eta = h^2 D^2,$$

$$\xi^4 + \eta^4 = (\xi^2 \eta^2)^2 - 2\xi^2\eta^2 = h^4(\Delta^2 - 2D^4).$$

6	2	5
3	0	1
7	4	8

图 5.5　节点结构

则由 Taylor 公式并采用上面的记号，$u(x+h)$ 的 Taylor 展开式可以写为

$$u(x+h)=\left(1+h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\frac{h^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\cdots+\frac{h^n}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\right)u(x)=e^{h\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}u(x),$$

由此可得

$$u_1=\mathrm{e}^{\xi}u_0,u_2=\mathrm{e}^{\eta}u_0,u_3=\mathrm{e}^{-\xi}u_0,u_4=\mathrm{e}^{-\eta}u_0,u_5=\mathrm{e}^{\xi+\eta}u_0,$$

记 $S_1=u_1+u_2+u_3+u_4$，$S_2=u_5+u_6+u_7+u_8$. 则

$$S_1=u_1+u_2+u_3+u_4=\left(1+\xi+\frac{\xi^2}{2}+\frac{\xi^3}{3!}+\frac{\xi^4}{4!}+1+\eta+\frac{\eta^2}{2}+\frac{\eta^3}{3!}+\frac{\eta^4}{4!}\right.$$

$$\left.+1-\xi+\frac{\xi^2}{2}-\frac{\xi^3}{3!}+\frac{\xi^4}{4!}+1-\eta+\frac{\eta^2}{2}-\frac{\eta^3}{3!}+\frac{\eta^4}{4!}\right)+O(h^6)$$

$$=4u_0+h^2\Delta u_0+\frac{1}{12}h^4(\Delta^2-2D^4)u_0+O(h^6).$$

同理可得

$$S_2=4u_0+2h^2\Delta u_0+\frac{1}{6}h^4(\Delta^2+4D^4)u_0+O(h^6).$$

从上面 2 个式子消除 D^4u_0，并忽略高阶项，得

$$4S_1+S_2-20u_0=6h^2f_{ij}+\frac{1}{2}h^4\Delta f_{ij}.$$

这就是九点差分格式. 从上面的推导可以知道此格式的局部截断误差是四阶的.

算例 2：以例 1 中的方程为例，用九点差分格式求近似解和误差.

解：根据九点差分格式

$$4S_1+S_2-20u_{ij}=6h^2f_{ij}+\frac{1}{2}h^4\Delta f_{ij}\Rightarrow 20u_{ij}=4S_1+S_2-6h^2f_{ij}-\frac{1}{2}h^4\Delta f_{ij}$$

$$\Rightarrow u_{ij}=\frac{4S_1+S_2-6h^2f_{ij}-\frac{1}{2}h^4\Delta f_{ij}}{20},$$

将 $S_1=u_{i-1,j}+u_{i+1,j}+u_{i,j-1}+u_{i,j+1}$，$S_2=u_{i-1,j-1}+u_{i-1,j+1}+u_{i+1,j-1}+u_{i+1,j+1}$

代入得 $u_{ij}=$

$$\frac{4(u_{i-1,j}+u_{i+1,j}+u_{i,j-1}+u_{i,j+1})+(u_{i-1,j-1}+u_{i-1,j+1}+u_{i+1,j-1}+u_{i+1,j+1})-6h^2 f_{ij}-\frac{1}{2}h^4\Delta f_{ij}}{20}.$$

利用 Matlab 求解此问题得近似解的图形如图 5.6 所示.

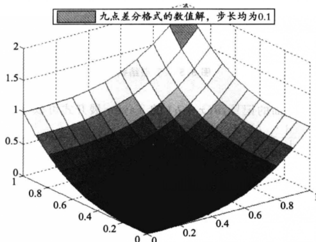


图 5.6 近似解曲面图

误差的曲面图如图 5.7 所示

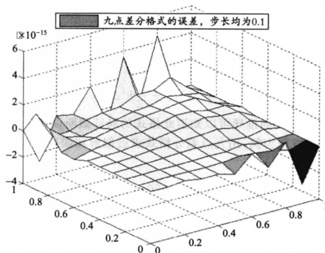


图 5.7 误差曲面图

3. 积分方法的差分格式

假设 x,y 方向的步长相同，记 $x_{i\pm\frac{1}{2}}=(i\pm\frac{1}{2})h,y_{j\pm\frac{1}{2}}=(j\pm\frac{1}{2})h$，在如图 5.8 所示的区域上考虑方程，

$$D=\{(x,y)\mid x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x\leqslant x_{i+\frac{1}{2}},y_{j-\frac{1}{2}}\leqslant y\leqslant j_{j+\frac{1}{2}}\},$$

对微分方程两端在区域 D 上积分，即

$$\int_D-\Delta u\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\int_D f\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

对积分方程的左端利用 Guass 公式得

$$\int_D-\Delta u\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\int_{\partial D}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=(\int_{l_1}+\int_{l_2}+\int_{l_3}+\int_{l_4})\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s$$

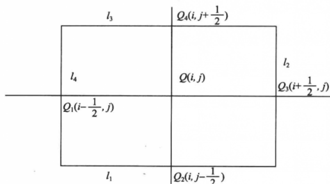


图 5.8

通过 Guass 公式将区域内部积分转到边界上的积分，由于积分区域是平行于坐标轴的矩形区域，实际上边界上的积分是定积分，即对于在边 l_1 上，因为 l_1 边平行于 x 轴，则它的外法向就是 y 轴的负方向，弧长的微分(弧微分) 是 $\mathrm{d}s=\mathrm{d}x$，因此有

$$\int_{l_1}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=-\int_{l_1}\frac{\partial u}{\partial y}\mathrm{d}x,$$

对上式得右端，再利用中矩形积分近似公式得到

$$-\int_{l_1}\frac{\partial u}{\partial y}\mathrm{d}x=-\frac{\partial u}{\partial y}(x_i,y_{j-\frac{1}{2}})h+O(h^3),$$

然后利用一阶中心差商，可得

$$-\frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})h + O(h^3) = -\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{h} \cdot h + O(h^3),$$

因此

$$\int_{l_1} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}s = -\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{h} \cdot h + O(h^2),$$

对于在边 l_2 上，因为 l_2 边平行于 y 轴，则它的外法向就是 x 轴的正方向，弧长的微分（弧微分）是 $\mathrm{d}s = \mathrm{d}y$，因此有

$$\int_{l_2} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}s = -\int_{l_2} \frac{\partial u}{\partial x} \mathrm{d}y.$$

对上式得右端，再利用中矩形积分近似公式得到

$$-\int_{l_2} \frac{\partial u}{\partial x} \mathrm{d}y = -\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)h + O(h^3),$$

然后利用一阶中心差商，可得

$$-\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j)h + O(h^2) = -\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} \cdot h + O(h^3),$$

因此

$$\int_{l_2} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}s = -\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} \cdot h + O(h^3).$$

可以类似地计算其他两边上的积分

$$\int_{l_3} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}s = \int_{l_3} \frac{\partial u}{\partial y} \mathrm{d}x = \frac{\partial u}{\partial y}(x_i, y_{j+\frac{1}{2}})h + O(h^3) = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{h} \cdot h + O(h^3),$$

$$\int_{l_4} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} \mathrm{d}s = -\int_{l_4} \frac{\partial u}{\partial x} \mathrm{d}y = \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)h + O(h^3) = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} \cdot h + O(h^3).$$

于是可以得到差分格式，即 5 点格式

$$u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{ij} = h^2 f_{ij}.$$

注：(1) 关于积分区域的选取，选择积分区域的方法不同，得到的格式也有所不同，在上面所给的方法中，积分区域是围绕节点的矩形，也可以直接用差分的网格作为积分区域，或者在非矩形网格（例如三角形网格）分格积分区域，如图 5.9，或者对偶剖分的区域，如图 5.10.

(2) 采用不同的数值积分或者不同导数近似，比如梯形积分公式或者向前差分等等，也可以得到不同的差分格式.

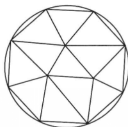


图 5.9

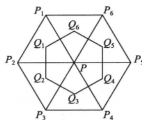


图 5.10

5.2　椭圆方程的边界离散处理

1. 矩形区域

第一类边界条件：$u(x,y)=\alpha(x,y),(x,y)\in\partial\Omega$.
离散边界条件 $u_{ij}=u(x_i,y_j)=\alpha(x_i,y_j),(x_i,y_j)\in\partial\Omega_h$.

第二类边界条件或者第三类边界条件：$\dfrac{\partial u}{\partial n}+\gamma u=\beta(x,y),(x,y)\in\partial\Omega$.

当 $\gamma=0$ 时，就是第二类边界条件. 此时离散边界条件的处理，如同前面双曲方程的边界处理一样，增加虚拟网格，于是得到如下的离散边界格式

$$\frac{u_{N+1,j}-u_{N-1,j}}{2h}+\gamma u_{N+1,j}=\beta_{N,j},$$

$$\frac{u_{1,j}-u_{-1,j}}{2h}+\gamma u_{0,j}=\beta_{0,j}.$$

2. 一般区域

当方程的区域是一般区域时，此时，方程的边界与差分格式的边界不一致. 下面分别讨论第一类边界条件和第三类边界条件的处理方法.

第一类边界条件，下面给出两种离散边界的方法：

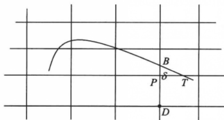


图 5.11

方法 1：直接转移法，就是在原始连续边界上找一个离离散边界最近的点作为离散边界节点的值，比如，如图 5.11 所示，离散边界节点 P 是定解区域内部点，此点函数值是未知，但在差分格式计算时是必须已知，我们采用直接转移法，离 P 点最近的边界点是 B，则令 $u(P)=u(B)$.

方法 2：线性插值法

离散边界上的节点 P 可以用 Q 和 T 两点作线性插值得到. 设 $TP=\delta$，则

$$u_P=\frac{h}{h+\delta}u_T+\frac{\delta}{h+\delta}u_Q,$$

当然，我们还可以用更高次的多项式进行插值，比如二次插值. 在此我们不作叙述.

第三类边界条件，下面给出两种差分格式离散边界条件的方法.

首先从简单的开始，当离散边界节点在微分方程边界上时. 如图 5.12 所示.

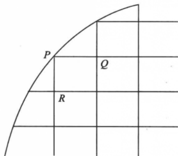


图 5.12

方法 1：如果边界曲线的外法向与坐标轴平行，则有

$$\frac{\partial u}{\partial n}=\pm\frac{\partial u}{\partial x}, \text{或者} \frac{\partial u}{\partial n}=\pm\frac{\partial u}{\partial y},$$

于是第三类边界条件的离散边界条件为

$$\pm\frac{u(P)-u(Q)}{h}+\gamma u(P)=\beta(P),$$

其中当外法向与坐标轴的正向相同时，取正号，否则取负号.

如果边界曲线的外法向与坐标轴不平行，则

$$\frac{\partial u(P)}{\partial n}=\frac{\partial u}{\partial x}\cos(n,x)+\frac{\partial u}{\partial y}\cos(n,y),$$

$$\frac{u(P)-u(Q)}{h}\cos(n,x)+\frac{u(P)-u(R)}{h}\cos(n,y)+\gamma(P)u(P)=\beta(P).$$

方法 2：积分插值法，利用积分守恒形式，积分守恒最大的好处就是很容易针对第二或者第三

类边界条件在边界点上建立离散边界条件的差分格式.

假设点 $P(i,j)$ 是微分方程边界上的点，如图 5.13，$P_1(i-1,j)$、$P_2(i,j+1)$ 是与点 P 相邻最近的内节点. 分别过线段 PP_1、PP_2 的中点分别作坐标轴的平行线，平行线相交于点 A，它们分别交于 $\partial\Omega$ 于 B，C，由此得到一曲边三角形 ABC，点 P 在曲边 BC 弧上. 取三角形 ABC 作为积分区域. 对方程两边在三角形 ABC 上积分

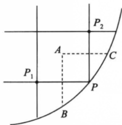


图 5.13

$$\int_{\partial ABC}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=\left(\int_{AB}+\int_{BC}+\int_{CA}\right)\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=\int_{ABC}f\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$$

$$\int_{AB}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=\int_{AB}\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}y\approx\frac{u_{ij}-u_{i-1,j}}{h}\mid AB\mid,$$

$$\int_{CA}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=\int_{CA}\frac{\partial u}{\partial y}\mathrm{d}x\approx\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{h}\mid AC\mid,$$

$$\int_{BC}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}}\mathrm{d}s=\int_{BC}(\beta-\gamma u)\mathrm{d}s\approx(\beta_{ij}-\gamma_{ij}u_{ij})\mid BC\mid,$$

$$\int_{ABC}f\mathrm{d}x\mathrm{d}y\approx f_{ij}S_{\Delta ABC}.$$

其中 $|AB|$，$|AC|$，$|BC|$ 分别是曲边三角形三边的长度. 综合上面四个式子得到边界点离散差分格式：

$$\frac{u_{ij}-u_{i-1,j}}{h}\mid AB\mid+\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{h}\mid AC\mid+(\beta_{ij}-\gamma_{ij}u_{ij})\mid BC\mid=f_{ij}S_{\Delta ABC}.$$

积分插值法有如下优点，第一，避免在边界点上近似法向导数，利用积分插值法，误差小，特别在边界不与坐标轴平行时，更是具有很好的性质. 第二，用积分插值法构造的差分格式的系数矩阵是对角线元素占优的矩阵. 如果区域边界用折线段近似，折线段的顶点都是网格线的交点，那么矩阵还是对称的. 这些性质会给求解方程带来很多方便.

如果离散边界节点不在微分方程边界上，首先将离散边界的节点转移到连续边界上最近的点. 然后再利用上面的各种方法类似地得到离散边界条件.

5.3 变系数椭圆方程的差分格式

考虑方程

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}\right)+c(x,y)u=f(x,y),$$

其中 $a(x,y)>\alpha>0, c(x,y)\geqslant 0, f(x,y)$ 都充分光滑.

1. 直接差分方法

与常系数方程类似,分别对两个方向的偏导数用中心差商代替,即

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{ij}=\frac{1}{h}\left(a_{i+\frac{1}{2},j}\frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h}-a_{i-\frac{1}{2},j}\frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{h}\right)+O(h^2),$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{ij}=\frac{1}{h}\left(a_{i,j+\frac{1}{2}}\frac{u_{i,j+1}-u_{ij}}{h}-a_{i,j-\frac{1}{2}}\frac{u_{i,j}-u_{i,j-1}}{h}\right)+O(h^2).$$

将上面两式代入微分方程,并忽略无穷小量,得到差分格式

$$\frac{1}{h}\left(a_{i+\frac{1}{2},j}\frac{u_{i+1,j}-u_{ij}}{h}-a_{i-\frac{1}{2},j}\frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{h}\right)$$
$$+\frac{1}{h}\left(a_{i,j+\frac{1}{2}}\frac{u_{i,j+1}-u_{ij}}{h}-a_{i,j-\frac{1}{2}}\frac{u_{i,j}-u_{i,j-1}}{h}\right)+c_{ij}u_{ij}=f_{ij},$$

局部截断误差是 $O(h^2)$.

2. 有限体积法(积分差分方法)

记 $x_{i\pm\frac{1}{2}}=(i\pm\frac{1}{2})h, y_{j\pm\frac{1}{2}}=(j\pm\frac{1}{2})h$,在如下区域上对方程积分,

$$D_{ij}=\{(x,y)\mid x_{j-\frac{1}{2}}\leqslant x\leqslant x_{j+\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}\leqslant y\leqslant j_{j+\frac{1}{2}}\},$$

即有 $\iint_{D_{ij}}\left[-\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}\right)+c(x,y)u\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\iint_{D_{ij}}f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$

$$\iint_{D_{ij}}\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}\mathrm{d}y\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\frac{\partial}{\partial x}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}x$$
$$=\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}\left[a(x_{i+\frac{1}{2}},y)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}},y)-a(x_{i-\frac{1}{2}},y)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}},y)\right]\mathrm{d}y.$$

对上式右端用中矩形积分近似有

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}\left[a(x_{i+\frac{1}{2}},y)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}},y)-a(x_{i-\frac{1}{2}},y)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}},y)\right]\mathrm{d}y$$
$$=\left[a(x_{i+\frac{1}{2}},y_j)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}},y_j)-a(x_{i-\frac{1}{2}},y_j)\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}},y_j)\right]h+O(h^3).$$

同理有

$$\iint_{D_{ij}} \frac{\partial}{\partial y}\left(a(x,y)\frac{\partial u}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$= \left[a(x_i,y_{j+\frac{1}{2}})\frac{\partial u}{\partial y}(x_i,y_{j+\frac{1}{2}}) - a(x_i,y_{j-\frac{1}{2}})\frac{\partial u}{\partial y}(x_i,y_{j-\frac{1}{2}})\right]h + O(h^3),$$

$$\iint_{D_{ij}} c(x,y)u\mathrm{d}x\mathrm{d}y = c_{ij}u_{ij}h^2 + O(h^4), \iint_{D_{ij}} f(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y = f_{ij}h^2 + O(h^4).$$

再由一阶中心差商近似一阶导数

$$\frac{\partial u}{\partial x}(x_{i+\frac{1}{2}},y_j) \approx \frac{u_{i+1,j}-u_{i,j}}{h},\quad \frac{\partial u}{\partial x}(x_{i-\frac{1}{2}},y_j) \approx \frac{u_{i,j}-u_{i-1,j}}{h}.$$

对于 y 方向的偏导数也可以类似地得到.

综合上述,并且忽略高阶无穷小量得到

$$-\frac{1}{h^2}\left[a_{i+\frac{1}{2},j}(u_{i+1,j}-u_{i+1,j}) - a_{i-\frac{1}{2},j}(u_{i,j}-u_{i-1,j})\right]$$

$$-\frac{1}{h^2}\left[a_{i,j+\frac{1}{2}}(u_{i,j+1}-u_{i,j}) - a_{i,j-\frac{1}{2}}(u_{i,j}-u_{i,j-1})\right] + c_{ij}u_{ij} = f_{ij},$$

这与直接法得到的五点格式完全相同.

积分插值法最大的优点在于对积分区域的灵活性,它不但适应于矩形网格,它还可以应用于其他比较复杂的区域,比如三角形网格剖分、非矩形网格的四边形网格剖分. 在下章讨论有限元的时候,再详细讨论其他网格剖分,积分插值法(有限体积法) 有类似于有限元的地方. 具体细节下章讨论.

3. 极坐标形式的差分格式

在椭圆方程中,我们经常遇到微分方程的定解区域是圆域、环形域或者扇形区域. 此时采用极坐标比较方便. 利用坐标变换

$$\begin{cases} x = r\cos\theta, \\ y = r\sin\theta, \end{cases}$$

Poisson 方程可以化为

$$\frac{1}{r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = -f(r,\theta).$$

并且坐标变换将 xoy 平面上圆域、环形域或者扇形区域映射为 $r-\theta$ 平面上有界矩形区域和半带状区域,即 $\{(r,\theta)\mid 0\leqslant\theta\leqslant 2\pi, 0\leqslant r\leqslant R\}$、$\{(r,\theta)\mid 0\leqslant\theta\leqslant 2\pi, R_1\leqslant r\leqslant R_2\}$ 和 $\{(r,\theta)\mid 0\leqslant\theta\leqslant\theta_0, 0\leqslant r\leqslant\infty\}$. 进行类似于直角坐标下的矩形剖分,不妨假设步长都为等步长的,在 r 轴方向的步长为 h, θ 轴方向的步长为 k.

从上面的方程可以看出,当系数 $r=0$ 时,系数是奇异的. 为此,我们补充条件

$$\lim_{r\to 0} r\frac{\partial u}{\partial r}=0.$$

首先考虑，节点不在$r-\theta$平面的θ轴上时的差分格式，可以利用前面的变系数的方法得到这些节点满足的差分格式

$$-\frac{r_{i+\frac{1}{2},j}(u_{i+1,j}-u_{i+1,j})-r_{i-\frac{1}{2},j}(u_{i,j}-u_{i-1,j})}{r_i h^2}-\frac{u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1}}{r_i^2 k^2}=f_{ij},i\geqslant 1,$$

现在考虑当节点在θ轴上时的差分格式，利用积分插值的方法，选取的积分区域为$[\varepsilon,h]\times[\theta_{j-\frac{1}{2}},\theta_{j+\frac{1}{2}}]$. 首先对微分方程的两边同时乘以$r$，然后积分，再对$\varepsilon$求极限，最后利用中矩形积分公式以及差商与微商的关系得到

$$-\frac{2}{h^2}(u_{1,j}-u_{0,j})-\frac{4}{h^2k^2}(u_{0,j+1}-2u_{0,j}+u_{0,j-1})=f_{0,j}.$$

联立上面两个式子得到极坐标下的差分格式.

上机练习

用差分格式计算下面的定解问题

1. $$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=-6(x+y),0<x<1,0<y<1,\\ u(x,0)=x^3,u(x,0)=1+x^3,0\leqslant x\leqslant 1,\\ u(0,y)=y^3,u(0,y)=1+y^3,0\leqslant y\leqslant 1.\end{cases}$$
精确解 $u(x,y)=x^3+y^3$.

2. $$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=0,0<x<1,0<y<1,\\ u(0,y)=\sin y+\cos y,u(1,y)=e(\sin y+\cos y),0\leqslant y\leqslant 1,\\ u(x,0)=e^x,u(x,1)=e^x(\sin 1+\cos 1),0<x<1.\end{cases}$$
精确解 $u(x,y)=e^x(\sin y+\cos y)$.

3. $$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=(\pi^2-1)e^x\sin(\pi y),0<x<2,0<y<1,\\ u(0,y)=\sin\pi y,u(1,y)=e\sin\pi y,0\leqslant y\leqslant 1,\\ u(x,0)=0,u(x,1)=0,0<x<1.\end{cases}$$
精确解 $u(x,y)=e^x\sin\pi y$.

要求：计算一些节点的值；画出精确解的曲面图；分别取$h=\frac{1}{50},\tau=\frac{1}{100}$；$h=\frac{1}{100},\tau=\frac{1}{200}$所得到数值解的曲面图；画出误差的曲面图.

第 6 章　数学物理方程的变分原理

前面几章介绍了用差分方法求解偏微分方程的近似值，在本章和第七章将介绍另外一种重要的数值求解方法 —— 有限元方法求解偏微分方程. 这种方法属于变分法的范畴，有限元方法是古典变分法与分片多项式相结合的产物. 首先介绍变分问题.

6.1　古典变分问题的例子

例 1：最小曲面问题

设 xoy 平面上的开区域 Ω，其边界记为 $\partial\Omega$，在 $\partial\Omega$ 上给定函数 $u\mid_{\partial\Omega}=\varphi(x,y)$，$\varphi(x,y)$ 是已知函数，于是得到一空间曲线 $C:\begin{cases}\varphi(x,y)=0\\ F(x,y,z)=0\end{cases}$，其中曲面 $\Sigma:F(x,y,z)=0$ 正是所要求的曲面，此曲面要求满足的条件是由曲线 C 在空间中所张成的曲面面积最小.

由微积分的知识可以推导出曲面 $\Sigma:F(x,y,z)=0$ 在开区域 Ω 上的面积表达式.

不妨假设函数 $F(x,y,z)=0$ 满足隐函数存在定理的条件，即有 $z=f(x,y)$，则曲面的面积为

$$S=\iint_{\Omega}\sqrt{1+\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^{2}+\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^{2}}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

很显然，曲面面积是关于函数 $f(x,y)$ 的函数，因此面积 S 是函数 $f(x,y)$ 的泛函. 其中函数 $f(x,y)$ 必须满足如下条件：(1) 存在连续的一阶偏导数，(2) $f(x,y)$ 在边界 $\partial\Omega$ 必须与 $\varphi(x,y)$ 相等. 用集合的概念描述为

$$f(x,y)\in K=\{u\mid u\in C^{1}(\overline{\Omega}),u\mid_{\partial\Omega}=\varphi(x,y)\},$$

于是，求最小曲面问题就可以转化为如下泛函极值的问题

$$\begin{cases}\text{求 } f_0\in K,\text{使得}\\ S(f_0)\leqslant S(f),\ \forall f\in K.\end{cases}$$

例 2：最速降线问题

求一条曲线，质量为 m 的质点在重力的作用下，沿此光滑曲线无摩擦运动，使质点从点 $A(0,0)$ 下降到点 $B(a,b)$ 的速度最快或者时间最短.

设任意一条过 A,B 两点的曲线的方程为 $y=y(x)$，点 P 是曲线上的任意一点，则质点过此点的速率是 $v=\dfrac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}$，由能量守恒有

$$\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\right)^2 = mgy \Rightarrow \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} = \sqrt{2gy}. \tag{1}$$

其中 s 是质点所走过的路程，即从 A 点到 P 点的弧长. 由弧微分公式

$$\mathrm{d}s = \sqrt{1+y'^2}\,\mathrm{d}x, \tag{2}$$

把(2) 代入(1) 有

$$\sqrt{1+y'^2}\,\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \sqrt{2gy}\ \text{或者}\ \mathrm{d}t = \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2gy}}\mathrm{d}x,$$

对上式两边进行积分得到从 A 点到 B 时间为

$$T = \int_0^a \frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2gy}}\mathrm{d}x.$$

曲线 $y = y(x)$ 要满足如下条件：(1) 函数 $y(x)$ 存在一阶导数，(2) 点 $A(0,0)$，$B(a,b)$ 必须在曲线上，即 $y(0) = 0$，$y(a) = b$. 用集合的概念描述为

$$K = \{y \mid y \in C^1[0,a], y(0) = 0, y(a) = b\}.$$

于是，求最速下降问题就可以转化为如下泛函极值的问题

$$\begin{cases} \text{求 } y \in K, \text{使得} \\ T(y_0) \leqslant T(y), \forall\, y \in K. \end{cases}$$

例 3：等周问题

在周长为 l 的所有平面光滑的封闭曲线中，求所围面积最大的曲线.

设封闭曲线的参数方程为 $\begin{cases} x = x(s) \\ y = y(s) \end{cases}$，$0 \leqslant s \leqslant T$，由弧长公式有，曲线方程应该满足如下方程

$$\int_a^b \sqrt{\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}s}\right)^2}\,\mathrm{d}s = l. \tag{3}$$

由封闭曲线所围成的面积公式有

$$S(x,y) = \frac{1}{2}\int_C x\mathrm{d}y - y\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_0^T (xy' - yx')\mathrm{d}s.$$

曲线 $\begin{cases} x = x(s) \\ y = y(s) \end{cases}$，$0 \leqslant s \leqslant T$ 要满足：函数 $x(s)$ 和 $y(s)$ 存在一阶导数，(2) 函数 $x(s)$ 和 $y(s)$ 满足(3). 用集合的概念描述为

$$K = \left\{(x,y) \mid x,y \in C^1[0,T], \int_a^b \sqrt{\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s}\right)^2 + \left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}s}\right)^2}\,\mathrm{d}s = l\right\}.$$

于是，等周问题转化为如下泛函极值的问题

$$\begin{cases} \text{求 } x_0, y_0 \in K, \text{使得} \\ S(x_0,y_0) \geqslant S(x,y), \forall\, x,y \in K. \end{cases}$$

例 4:(短程线问题)

求在曲面 $F(x,y,z)=0$ 上给定两点 $A(x_1,y_1,z_1)$, $B(x_2,y_2,z_2)$ 之间最短曲线的方程. 比如,球面上任意两点之间的球面上距离最短的曲线就是过这两点的大圆的劣弧.

设 x 为参数,曲面上的光滑曲线用参数方程 $y=y(x)$, $z=z(x)$ 表示. 那么过 A,B 两点的曲线长度为

$$L(y,z)=\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{1+(y'(x))^2+(z'(x))^2}\,\mathrm{d}x,$$

曲线 $\begin{cases}y=y(x)\\z=z(x)\end{cases}$, $x_1\leqslant x\leqslant x_2$ 要满足:(1) 函数 $y(x)$ 和 $z(x)$ 存在一阶导数,(2) 函数满足 $y(x_i)=y_i$, $z(x_i)=z_i(i=1,2)$. 用集合的概念描述为

$$K=\{(y,z)\mid y,z\in C^1[x_1,x_2],y(x_i)=y_i,z(x_i)=z_i\}(i=1,2),$$

于是,短程线问题转化为如下泛函极值的问题

$$\begin{cases}\text{求 } y_0,z_0\in K,\text{使得}\\L(y_0,z_0)\leqslant L(y,z),\ \forall\, y,z\in K.\end{cases}$$

总结上面四个实际问题的例子,都是研究泛函在某个集合上的极值问题. 这就是古典变分问题. 下面考虑一般的变分问题.

6.2　变分法

1.　二次函数的极值问题

变分法是构造微分方程数值解的基础,有很重要的实际和理论意义. 为了易于理解,首先以大家较为熟悉的 n 元二次函数的极值问题为例,介绍变分法.

在 n 维欧氏空间考虑二次函数

$$J(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n}a_{i,j}x_ix_j-\sum_{i=1}^{n}b_ix_i,$$

令 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})_{n\times n}$, $a_{ij}=a_{ji}$, $\boldsymbol{x}=(x_1,\cdots,x_n)^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{b}=(b_1,\cdots,b_n)^{\mathrm{T}}$,并且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定的,则

$$J(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})-(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x}).$$

其中$(\cdot,\cdot)$ 表示 n 维欧氏空间中的向量内积.

由微积分的知识,二次函数在点 $\boldsymbol{x}_0=(x_1^0,x_2^0,\cdots,x_n^0)^{\mathrm{T}}$ 取极值的必要条件是

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j^0-b_i=0,\quad i=1,2,\cdots,n,$$

即 $\boldsymbol{Ax}_0-\boldsymbol{b}=0$.

下面从另外一个角度来讨论二次函数的极值问题.

设二次泛函 $J(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_0$ 达到极小,则对于一切 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n,\boldsymbol{x}\neq 0,\alpha\in\mathbf{R}$,令 $\varphi(\alpha)=J(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{x})$,则 $\varphi(\alpha)=J(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{x})\geqslant J(x_0)=\varphi(0)$. 于是,把多元变量的函数极值问题转化单变量函数极值问题.

$$\begin{aligned}\varphi(\alpha)&=J(\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{Ax}_0+\alpha\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{x})-(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x}_0+\alpha\boldsymbol{x})\\&=\frac{1}{2}[(\boldsymbol{Ax}_0,\boldsymbol{x}_0)+\alpha(\boldsymbol{Ax}_0,\boldsymbol{x})+\alpha(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x}_0)+\alpha^2(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})]-(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x}_0)-\alpha(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x})\\&=J(\boldsymbol{x}_0)+\alpha(\boldsymbol{Ax}_0-\boldsymbol{b},\boldsymbol{x})+\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x}).\end{aligned}$$

若 $\varphi(\alpha)$ 在 $\alpha=0$ 达到极小,有 $\varphi'(0)=0$,即

$$(\boldsymbol{Ax}_0-\boldsymbol{b},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0},\ \forall\,\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n,$$

因此 $\boldsymbol{Ax}_0-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$.

又因为 $\alpha=0$ 是极小值点,则有 $\varphi''(\alpha)=(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})>0$,则有矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定的.

假设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定的,且 $\boldsymbol{Ax}_0-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$,因此有

$$\varphi(\alpha)=J(\boldsymbol{x}_0)+\frac{\alpha^2}{2}(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})\geqslant J(\boldsymbol{x}_0)=\varphi(0),$$

当且仅当 $\alpha=0$ 时,等号成立. 于是有如下定理成立.

定理:若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是对称正定阵,则下面三个命题等价:

(1)$\boldsymbol{x}_0$ 是方程 $\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$ 的解.

(2)$(\boldsymbol{Ax}_0,\boldsymbol{x})-(\boldsymbol{b},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ 对一切 $\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$ 成立.

(3)$\boldsymbol{x}_0\in\mathbf{R}^n$ 是二次函数 $J(\boldsymbol{x})$ 的极小值点,即 $J(\boldsymbol{x}_0)=\min\limits_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n}J(\boldsymbol{x})$.

2. 泛函的极值问题

考虑实值泛函

$$J(u)=\int_l f(x,u,u')\mathrm{d}x,$$

其中 $f(x,u,u')$ 是 $\mathbf{R}^3$ 上的某个区域上的二次连续可微的函数. 再考虑一个函数集合 K,例如:

$$C[a,b]=\{f(x)\mid f(x)\text{ 在}[a,b]\text{ 上连续}\},\text{称为连续函数空间},$$
$$C^1[a,b]=\{f(x)\mid f'(x)\text{ 在}[a,b]\text{ 上连续}\},\text{称为一阶连续函数空间},$$
$$C_0^1[a,b]=\{f(x)\mid f\in C^1[a,b],f(a)=f(b)=0\},$$
$$L^2[a,b]=\{f(x)\mid \int_a^b f^2(x)\mathrm{d}x<\infty\},\text{称为平方可积函数空间}$$

等等,这些集合称为容许函数类集合.

变分法的典型例子是:求函数 $u\in K$,使得

$$J(u)=\min_{u\in M}J(v).$$

如果泛函的形式不同,容许函数类不同,就可以得到不同的变分问题.

由于求解变分问题一般都很困难,经常无法断定变分问题是否有解,或者有几个解,至于求出它的解更是困难重重. 在本书中,为了讨论的简单,仅讨论比较简单的泛函在某些特殊的函数类上的极值问题. 其具体求法与微积分中求函数极值问题类似. 下面讨论求泛函极值的方法. 首先给出如下定理.

定理(变分基本引理) 设 $f(x)\in C[a,b]$,且对一切 $g(x)\in C_0^1[a,b]$,如果

$$\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x=0,$$

则 $f(x)=0,\forall x\in[a,b]$.

证明略. 为了简单便于理解,我们只给一维时的变分基本引理,高维的变分引理类似,在此不作过多叙述.

为了讨论泛函的极值,给出类似于微积分中的一些概念. 比如邻域、极值等.

设函数集合 K,函数 $f\in K$,则称 $\delta(f)=\{g\,\|\,f(x)-g(x)\,|<\varepsilon,\forall x\in[a,b]\}$ 为函数 $f(x)$ 的**邻域**.

如果函数 $f\in K$,且对任何 $g(x)\in\delta(f)$ 都有 $J(f(x))\leqslant J(g(x))$,则称函数 $f(x)$ 是泛函 $J(\cdot)$ 的**局部极小值**.

现在讨论局部极小值的必要条件. 设函数 $f(x)$ 是泛函的局部极小值. 考虑给函数 $f(x)$ 一个微小的摄动,得到一个新函数

$$f_\alpha(x)=f(x)+\alpha\eta(x),$$

其中 $\eta(x)\in C_0^1[a,b]$,α 是充分小的实数,使得 $f_\alpha(x)\in\delta(f)$.

考虑泛函 $J(f)=\int_a^b F(x,f,f')\mathrm{d}x$,则

$$J(f+\alpha\eta)=\int_a^b F(x,f(x)+\alpha\eta(x),f'(x)+\alpha\eta'(x))\mathrm{d}x,$$

因为 $f(x)$ 是泛函的局部极小值,则有 $J(f)\leqslant J(f+\alpha\eta)$.

令 $\varphi(\alpha)=J(f+\alpha\eta)$,因此得到 0 是函数 $\varphi(\alpha)$ 的极小值点. 由此把一个泛函的极值问题转化为我们熟悉的函数极值问题. 因此

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}\alpha}\right|_{\alpha=0}=\int_a^b\left(\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f}\eta(x)+\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f'}\eta'(x)\right)\mathrm{d}x=0.$$

由分部积分可以得到

$$\begin{aligned}\int_a^b\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f'}\eta'(x)\mathrm{d}x&=\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f'}\eta(x)\,\Big|_{x=a}^{x=b}-\int_a^b\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f'}\right)\eta(x)\mathrm{d}x\\&=-\int_a^b\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F(x,f,f')}{\partial f'}\right)\eta(x)\mathrm{d}x,\end{aligned}$$

于是

$$\int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial f} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\right)\right]\eta(x)\mathrm{d}x = 0.$$

由变分基本引理有

$$\frac{\partial F}{\partial f} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\right) = 0. \tag{4}$$

这就是 $f(x)$ 在集合 K 内使泛函 $J(\cdot)$ 达到极小的必要条件. 方程(4) 称为 Eular 方程. 另外称 $\delta_J = \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}\alpha}\big|_{\alpha=0}$ 称为泛函 $J(\cdot)$ 的一阶变分. 同理可以定义高阶变分,比如二阶变分

$$\delta_J^2 = \frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}\bigg|_{\alpha=0} = \int_a^b \Big[\frac{\partial^2 F(x,f,f')}{\partial f^2}\eta^2(x) + 2\frac{\partial^2 F(x,f,f')}{\partial f \partial f'}\eta(x)\eta'(x) + \frac{\partial^2 F(x,f,f')}{\partial f'^2}(\eta'(x))^2\Big]\mathrm{d}x.$$

例 5:考虑泛函

$$J(y) = \frac{1}{2}\int_a^b \left[p(x)\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)^2 + q(x)y^2 - 2f(x)y\right]\mathrm{d}x,$$

求 Eular 方程.

设 $F(x,y,y') = \frac{1}{2}\left[p(x)\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)^2 + q(x)y^2 - 2f(x)y\right]$,则

$$\frac{\partial F}{\partial y} = q(x)y - f(x), \quad \frac{\partial F}{\partial y'} = p(x)y',$$

因此 Eular 方程为

$$q(x)y - f(x) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(p(x)y') = 0.$$

例 6:在第一章中,讨论了薄膜震动的问题. 在薄膜震动过程中,因为薄膜发生形变而产生应变能,当薄膜上的质点位移是 $u(x,y)$,张力是 T,那么形变能是

$$W_i = \frac{1}{2}\iint_\Omega T(u_x^2 + u_y^2)\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$$

外力所做的功是

$$W_e = \iint_\Omega f(x,y)u(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

则薄膜的总位能是

$$\begin{aligned} J(u) &= \frac{1}{2}\iint_\Omega [T(u_x^2 + u_y^2) - 2f(x,y)u(x,y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ &= \frac{1}{2}\iint_\Omega [T(\nabla u)^2 - 2f(x,y)u(x,y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y \end{aligned}$$

我们所感兴趣的是当薄膜总能量最小时,位移应该满足:

$$J(u) = \min_{v \in K} J(v),$$

很容易计算得到 Eular 方程

$$-\nabla \cdot (T \nabla u) = f(x,y).$$

当 $u(x,y)$ 是薄膜的位移时，如果薄膜的边界固定，因此，必然满足薄膜的边界条件，即

$$u(x,y)\mid_{\Gamma} = g(x,y). \tag{5}$$

这就是 Poisson 方程第一边值问题.

如果薄膜的边界是自由的，不受外力的作用. 因为薄膜能量最小时，泛函的一阶变分等于 0，即

$$J(u+\alpha\eta) = \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(\nabla(u+\alpha\eta))^2 - 2f(x,y)(u+\alpha\eta)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$\delta J = \frac{\mathrm{d}J(u+\alpha\eta)}{\mathrm{d}\alpha}\Big|_{\alpha=0} = \iint_{\Omega}[T\nabla u\nabla\eta - f(x,y)\eta]\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$= \iint_{\Omega}[-\nabla\cdot(T\nabla u) - f(x,y)]\eta\mathrm{d}x\mathrm{d}y - \int_{\partial\Omega}\frac{\partial u}{\partial n}\eta\mathrm{d}s = 0.$$

由变分基本引理

$$\begin{cases} -\nabla\cdot(T\nabla u) - f = 0, & (x,y)\in\Omega \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = 0, & (x,y)\in\partial\Omega \end{cases} \tag{6}$$

这是第二类边值问题.

注：(5) 是本质边界条件，它是由于限制了薄膜在边界上的位移而给出的，在容许函数类中是明确规定的. (6) 的边界条件是自然边界条件，因为薄膜的边界位移没有限制，也不受外力的作用. 从上面的推导可以看出第二类边界条件正是如此. 关于自然边界条件再给出一个例子.

例 7：考虑泛函

$$\begin{aligned} J(u) &= \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(u_x^2+u_y^2) - 2f(x,y)u(x,y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega}(\frac{1}{2}\beta u^2 - \gamma u)\mathrm{d}s \\ &= \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(\nabla u) - 2f(x,y)u(x,y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega}(\frac{1}{2}\beta u^2 - \gamma u)\mathrm{d}s \end{aligned} \tag{7}$$

的极值点所满足的方程.

$$J(u+\alpha\eta) = \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(\nabla(u+\alpha\eta))^2 - 2f(x,y)(u+\alpha\eta)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y +$$

$$\int_{\partial\Omega}[\frac{1}{2}\beta(u+\alpha\eta)^2 - \gamma(u+\alpha\eta)]\mathrm{d}s.$$

$$\delta J = \frac{\mathrm{d}J(u+\alpha\eta)}{\mathrm{d}\alpha}\Big|_{\alpha=0} = \iint_{\Omega}[T\nabla u\nabla\eta - f(x,y)\eta]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega}(\beta u-\gamma)\eta\mathrm{d}s.$$

$$= \iint_{\Omega} [-\nabla \cdot (T\nabla u) - f(x,y)] \eta \mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega} (T\frac{\partial u}{\partial n} + \beta u - \gamma) \eta \mathrm{d}s = 0.$$

由变分基本引理

$$\begin{cases} -\nabla \cdot (T \nabla u) - f = 0, & (x,y) \in \Omega \\ T\dfrac{\partial u}{\partial n} + \beta u - \gamma = 0, & (x,y) \in \partial\Omega \end{cases} \tag{8}$$

这个边界条件也是自然边界条件.

注:从上面的几个例子可以看出,泛函对函数 $u(x,y)$ 的条件比微分方程要求的条件低,前者只要一阶可导,而微分方程要二阶可导.因此只要函数 $u(x,y)$ 满足一定的条件,就可以得到如下定理.

定理:(最小位能原理) 设 $u \in C^1(\overline{\Omega}) \cap C^2(\Omega)$,并且是泛函(7) 的极小值点,则 $u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解.反之,$u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解,则 $u(x,y)$ 是泛函(7) 的极小值点.

证明:定理的第一部分已经在上面已经讨论了,下面证明定理的第二部分.

如果 $u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解,考虑泛函(7),取函数 $u+\alpha\eta$,

$$\begin{aligned} J(u+\alpha\eta) &= \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(\nabla(u+\alpha\eta))^2 - 2f(x,y)(u+\alpha\eta)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \\ &\quad \int_{\partial\Omega}(\frac{1}{2}\beta(u+\alpha\eta)^2 - \gamma(u+\alpha\eta))\mathrm{d}s \\ &= \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[T(\nabla u)^2 + 2\alpha T\nabla u\nabla\eta + \alpha^2(\nabla\eta) - 2f(x,y)u - 2\alpha f(x,y)\eta]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \\ &\quad \int_{\partial\Omega}(\frac{1}{2}\beta u^2 + \alpha\beta u\eta + \frac{1}{2}\alpha\eta^2 - \gamma u - \alpha\gamma\eta)\mathrm{d}s \\ &= J(u) + \frac{1}{2}\iint_{\Omega}[2\alpha T\nabla u\nabla\eta - 2\alpha f(x,y)\eta]\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \frac{1}{2}\iint_{\Omega}\alpha^2(\nabla\eta)\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \\ &\quad \int_{\partial\Omega}(\alpha\beta u\eta - \alpha\gamma\eta)\mathrm{d}s + \int_{\partial\Omega}\frac{1}{2}\alpha^2\eta^2\mathrm{d}s. \end{aligned}$$

对上式中的第二项由 Guass 公式有

$$\begin{aligned} &= J(u) + \alpha\iint_{\Omega}[-\nabla\cdot(T\nabla u) - f(x,y)]\eta\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \frac{1}{2}\iint_{\Omega}\alpha^2(\nabla\eta)\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \\ &\quad \alpha\int_{\partial\Omega}(T\frac{\partial u}{\partial n} + \beta u - \gamma)\eta\mathrm{d}s + \int_{\partial\Omega}\frac{1}{2}\alpha^2\eta^2\mathrm{d}s. \end{aligned}$$

因为 $u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解,于是上式的第二项和第四项等于 0.因此

$$J(u+\alpha\eta) = J(u) + \frac{1}{2}\iint_{\Omega}\alpha^2(\nabla\eta)^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega}(\frac{1}{2}\alpha^2\eta^2)\mathrm{d}s > J(u).$$

因此,$u(x,y)$ 是泛函(7) 的极小值点.

因为上面的泛函在物理学上通常表示物体的位能,所以此定理称为最小位能原理.

下面仍然考虑边值问题,设 $u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解. 对微分方程(8) 两边同时乘以 $v(x,y)\in C_0^1(\overline{\Omega})$,然后在 Ω 上积分,由 Guass 公式以及边界条件

$$\begin{aligned}
&-\iint_{\Omega}(\nabla\cdot(T\nabla u)+f(x,y))v\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\
&=\iint_{\Omega}(T\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}+T\frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}-fv)\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int_{\partial\Omega}T\frac{\partial u}{\partial n}v\mathrm{d}s\\
&=\iint_{\Omega}T\nabla u\nabla v\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\iint_{\Omega}fv\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int_{\partial\Omega}(-\beta u+\gamma)v\mathrm{d}s\\
&=0.
\end{aligned}$$

于是,满足边值问题的解 $u(x,y)$ 也必须满足

$$\iint_{\Omega}T\nabla u\nabla v\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\iint_{\Omega}fv\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int_{\partial\Omega}(-\beta u+\gamma)v\mathrm{d}s=0,\quad\forall v(x,y)\in C_0^1(\overline{\Omega})\tag{9}$$

反过来,如果 $u(x,y)$ 是上式(9) 的解,并且 $u\in C^1(\overline{\Omega})\cap C^2(\Omega)$. 由 Guass 公式有

$$\begin{aligned}
&\iint_{\Omega}T\nabla u\nabla v\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\iint_{\Omega}fv\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int_{\partial\Omega}(-\beta u+\gamma)v\mathrm{d}s\\
&=\int_{\partial\Omega}T\frac{\partial u}{\partial n}v\mathrm{d}s-\iint_{\Omega}(\nabla\cdot(T\nabla u)+f(x,y))v\mathrm{d}x\mathrm{d}y-\int_{\partial\Omega}(-\beta u+\gamma)v\mathrm{d}s\quad\forall v(x,y)\in C_0^1(\overline{\Omega})\\
&=-\iint_{\Omega}(\nabla\cdot(T\nabla u)+f(x,y))v\mathrm{d}x\mathrm{d}y+\int_{\partial\Omega}(T\frac{\partial u}{\partial n}+\beta u-\gamma)v\mathrm{d}s=0.
\end{aligned}$$

由变分基本引理得到

$$\begin{cases}-\nabla\cdot(T\nabla u)-f=0,\quad(x,y)\in\Omega\\ T\dfrac{\partial u}{\partial n}+\beta u-\gamma=0,\quad(x,y)\in\partial\Omega\end{cases}$$

于是,得到如下定理.

定理:设 $u\in C^1(\overline{\Omega})\cap C^2(\Omega)$,并且是(9) 的解,则 $u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解. 反之,$u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解,则 $u(x,y)$ 是(9) 的解.

说明:从上面可以看出,此式(9) 的左端是泛函(8) 的一阶变分,因此有 $\delta J(u,v)=0$,如果将 $v(x,y)$ 看成位移函数 $u(x,y)$ 的增量,它表示弹性力学中的“虚位移”. 因此(9) 的力学上的意义:在平衡状态下,任给一个满足约束条件的虚位移,则物体所受外力所做的功,等于物体所受惯性力所做的功,是力学上的虚功原理,因此,此定理也叫虚功原理,方程(9) 称为虚功方程.

总结上面两个定理,可以得到如下三个问题之间在一定条件下的等价关系.

设 $u\in C^1(\overline{\Omega})\cap C^2(\Omega)$

(1)$u(x,y)$ 是泛函(7) 的极小值点;

(2)$u(x,y)$ 是边值问题(8) 的解;

(3)$u(x,y)$ 是(9) 的解.

通常把这三个问题的等价关系称之为变分原理.

从上面的证明可以看出，问题(7) 和问题(9) 对解的存在性，要求的条件比问题(8) 的条件弱. 前者只要求 $C^1(\overline{\Omega})$，而后者要求 $C^2(\Omega)$. 另外，这三个问题都是讨论薄膜在平衡位置的振动过程. 然而每个问题却反映了不同的力学原理. 问题(7) 是反映的最小位势原理，问题(8) 是反映的力平衡原理，问题(9) 反映的是虚功原理.

为了书写的简洁，引入如下记号，这些记号在后经常用到.

$$a(u,v)=\iint_\Omega T\,\nabla u\,\nabla v\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y+\int_{\partial\Omega}\beta uv\,\mathrm{d}s,$$

$$L(v)=\iint_\Omega fv\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y+\int_{\partial\Omega}\gamma v\,\mathrm{d}s,$$

于是泛函极值问题可以改写为：求 $u\in K$ 使得

$$J(u)=\min_{v\in K}J(v),$$

其中 $J(v)=\dfrac{1}{2}a(v,v)-L(v)$.

(9) 改写为：$a(u,v)=L(v),\quad \forall v\in C_0^1(\Omega)$

如果 $a(u,v)$ 满足，$\forall \alpha_1,\alpha_2,\beta_1,\beta_2\in\mathbf{R}$，$\forall u_1,u_2,v_1,v_2\in K$，都有

$$\begin{aligned}a(\alpha_1u_1+\alpha_2u_2,\beta_1u_1+\beta_2u_2)&=\alpha_1\beta_1a(u_1,v_1)+\alpha_1\beta_2a(u_1,v_2)\\&\quad+\alpha_2\beta_1a(u_2,v_1)+\alpha_2\beta_2a(u_2,v_2),\end{aligned}$$

称 $a(u,v)$ 为双线性泛函.

6.3 变分问题的数值计算方法

1. Ritz 方法

求二次泛函　$J(v)=\dfrac{1}{2}a(v,v)-L(v)$ 的数值，即

$$J(u)=\min_{v\in K}J(v).\tag{10}$$

$a(u,v)$ 是 $C^1(\overline{\Omega})$ 上的双线性泛函，$L(v)$ 是 $C^1(\overline{\Omega})$ 上有界的线性泛函. 而且满足

(1) 对称性：如果　$a(u,v)=a(v,u),\quad \forall u,v\in V$,

(2) 有界性：如果　$|a(u,v)|\leqslant c\|u\|\cdot\|v\|,\quad \forall u,v\in V$,

(3) 正定性：如果　$a(u,u)\geqslant c\|u\|^2,\quad \forall u\in V$.

其中 $\|\cdot\|$ 是集合 V 上的某个范数.

设 S_n 是 $C^1(\overline{\Omega})$ 的一个有限维(n 维) 子空间，设 $\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n$ 是 V 中 n 个线性无关的元素，并且 $\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n$ 是子空间 S_n 的基底，因此

$$S_n=\operatorname{span}\{\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_n\}.$$

并且子空间 S_n 与空间 $C^1(\overline{\Omega})$ 之间还有如下关系.

$$\lim_{n\to\infty} S_n = C^1(\overline{\Omega}).$$

用子空间 S_n 代替容许函数空间 $C^1(\overline{\Omega})$，在子空间上求泛函的极小值，即求 $u_n \in S_n$ 使得

$$J(u_n) = \min_{v\in S_n} J(v).$$

任取 $\forall w_n \in S_n$，则 $w_n = \sum_{i=1}^{n} c_i\varphi_i$，其中$\{c_i\}_{i=1}^{i=n}$ 是一组实数.

$$\begin{aligned} J(w_n) &= \frac{1}{2}a(w_n, w_n) - L(w_n) \\ &= \frac{1}{2}a\left(\sum_{i=1}^{n} c_i\varphi_i, \sum_{j=1}^{n} c_j\varphi_j\right) - L\left(\sum_{i=1}^{n} c_i\varphi_i\right) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{n} c_ic_j a(\varphi_i, \varphi_j) - \sum_{i=1}^{n}[c_iL(\varphi_i)]. \end{aligned}$$

从上式可以看出，将一个泛函极小的问题转化为一个求 n 元$\{c_i\}_{i=1}^{i=n}$ 二次函数极小的问题.

二次函数的系数矩阵为 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$，其中

$$a_{ij} = a(\varphi_i, \varphi_j), \quad i,j = 1,2,3,\cdots,n.$$

因为双线性泛函 $a(u,v)$ 是对称正定的，则矩阵 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$ 是对称正定的. 因此，二次函数存在极小值点$\{c_i^0\}_{i=1}^{i=n}$，使得

$$\frac{\partial J(w_n)}{\partial c_i}\Big|_{c_i^0} = 0, \quad = 1,2,\cdots,n.$$

即

$$\sum_{j=1}^{n} a(\varphi_i, \varphi_j)c_j^0 - L(\varphi_i) = 0, \quad i = 1,2,\cdots,n. \tag{11}$$

由于系数行列式不为零，故有唯一解. 从而得到问题的解，求出$\{c_i^0\}_{i=1}^{i=n}$，得到近似解

$$u_n = \sum_{i=1}^{n} c_i^0\varphi_i.$$

下面总结 Ritz 方法的思想：把求变分问题的近似解变为求解变分问题的容许函数空间的近似. 所以，在容许函数空间中选择适当的有限维的函数空间序列 S_n，使得当此空间维数趋近无穷大时，此时有限维的函数空间的极限就是容许函数集合空间本身. 然后把原变分问题的无穷维问题转化为在所选择的函数空间 S_n 上的有限维变分问题.

2. Galerkin 方法

当变分问题的双线性泛函 $a(u,v)$ 是对称的时候，变分问题(10) 等价于(9)，即求 $u \in V$ 使得对于 $v \in V$，有

$$a(u,v) - L(v) = 0. \tag{12}$$

取有限维子空间 S_n 为

$$S_n = \mathrm{span}\{\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n\},$$

于是问题变为求近似变分问题

$$\text{求 } u_n \in S_n, \text{使 } \forall v_n \in S_n, \text{有}$$
$$a(u_n, v_n) - L(v_n) = 0.$$

因为 $u_n \in S_n, v_n \in S_n$,则可取

$$u_n = \sum_{i=1}^{n} c_i^0 \varphi_i, \quad v_n = \sum_{i=1}^{n} c^i \varphi_i.$$

代入(12) 得

$$a(u_n, v_n) - L(v_n) = \sum_{i,j=1}^{n} a(\varphi_i, \varphi_j) c_j^0 c_i - \sum_{i=1}^{n} c_i L(\varphi_i)$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \Big[\sum_{j=1}^{n} a(\varphi_i, \varphi_j) c_j^0 - L(\varphi_i)\Big] c_i = 0,$$

由 $\{c_1, \cdots, c_n\}^{\mathrm{T}}$ 的任意性,得:

$$\sum_{j=1}^{n} a(\varphi_i, \varphi_j) c_j^0 - L(\varphi_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, n. \tag{13}$$

系数阵是正定的.

注:① 比较(11) 和(13),从形式上看两者完全一样,但是它们是有区别的.如果没有假设双线性泛函的对称性,很显然,问题(10) 和问题(12) 是不等价的,因为用 Ritz 方法就无法得到(11),然而使用 Galerkin 方法仍然能得到方程组(13).这说明 Galerkin 方法的适用性广.
② 关于子空间 S_n 的选取,在实际应用中,得到子空间 S_n 是很困难的事情.因为所选取的基函数必须满足一定的条件,比如光滑性,由基函数张成的子空间能够近似容许函数类空间,以及边界条件等等.

例 8:求两点边值问题

$$\begin{cases} -\dfrac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} = x^2, 0 < x < 1, \\ u(0) = 0, u(1) = 0, \end{cases}$$

的一个近似解.

解:取容许函数空间

$$V = C_0^1[0,1] = \{v \mid v \in c^1[0,1], v(0) = 0, v(1) = 0\},$$

取子空间 $S_2 = \mathrm{span}\{\varphi_1, \varphi_2\}$,其中 $\varphi_1 = x(1-x), \varphi_2 = x^2(1-x)$.
双线性泛函和线性泛函分别为

$$a(u, v) = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}x, \quad L(v) = \int_0^1 x^2 v \mathrm{d}x.$$

(1)Ritz 方法

考虑二次泛函

$$J(v)=\frac{1}{2}a(v,v)-L(v)=\int_0^1\Big[\Big(\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\Big)^2-x^2v\Big]\mathrm{d}x,$$

令 $v=c_1\varphi_1+c_2\varphi_2$，代入上式，

并分别对 c_1,c_2 求导. 令导数为 0，即

$$\frac{\partial J(c_1\varphi_1+c_2\varphi_2)}{\partial c_1}=2c_1\int_0^1\Big(\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\Big)^2\mathrm{d}x+2c_2\int_0^1\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\frac{d\varphi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x-\int_0^1x^2\varphi_1\mathrm{d}x=0,$$

$$\frac{\partial J(c_1\varphi_1+c_2\varphi_2)}{\partial c_2}=2c_1\int_0^1\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x+2c_2\int_0^1\Big(\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}\Big)^2\mathrm{d}x-\int_0^1x^2\varphi_2\mathrm{d}x=0,$$

即　$\sum_{j=1}^{2}a(\varphi_i,\varphi_j)c^j-L(\varphi_i)=0,\quad i=1,2.$

下面计算系数的值：

$$a(\varphi_1,\varphi_1)=\int_0^1\Big(\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\Big)^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3},$$

$$a(\varphi_1,\varphi_2)=\int_0^1\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\cdot\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x=\int_0^1(1-2x)(2x-3x^2)\mathrm{d}x=\frac{1}{6},$$

$$a(\varphi_2,\varphi_1)=a(\varphi_1,\varphi_2)=\frac{1}{6},$$

$$a(\varphi_2,\varphi_2)=\int_0^1\Big(\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}\Big)^2\mathrm{d}x=\int_0^1(2x-3x^2)\mathrm{d}x=\frac{2}{15},$$

$$L(\varphi_1)=\int_0^1x^3(1-x)\mathrm{d}x=\frac{1}{20},$$

$$L(\varphi_2)=\int_0^1x^4(1-x)\mathrm{d}x=\frac{1}{30}.$$

得到方程组

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & \frac{1}{6}\\ \frac{1}{6} & \frac{2}{15}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{20}\\ \frac{1}{30}\end{pmatrix}.$$

解得　$c_1=\frac{1}{15},c_2=\frac{1}{6}$，

因此近似解为

$$u_2=\frac{1}{15}x(1-x)+\frac{1}{6}x^2(1-x)=\frac{1}{30}x(1-x)(2+5x),$$

其真解为$\frac{x}{12}(1-x^3)$.

(2)Galerkin 方法

Galerkin 方法的变分形式是:求 $u_n \in S_n$,使 $\forall v_n \in S_n$,有 $a(u_n, v_n) - L(v_n) = 0$ 成立.令 $v_n = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$,$u_n = c_1^0\varphi_1 + c_2^0\varphi_2$,代入上式得

$$\sum_{i=1}^{2}\left[\sum_{j=1}^{2} a(\varphi_i, \varphi_j)c_j^0 - L(\varphi_i)\right]c_i = 0, \quad i = 1,2,$$

由$\{c_1, c_2\}^{\mathrm{T}}$ 的任意性,得:

$$\sum_{j=1}^{2} a(\varphi_i, \varphi_j)c_j^0 - L(\varphi_i) = 0, \quad i = 1,2.$$

如下的计算和 Ritz 方法完全相同.

当强制边界条件是非齐次时,比如一维情况,$u(0) = a$,此时,离散变分形式的解取

$$u_n = u_0 + \sum_{i=1}^{n} c_i^0\varphi_i,$$

其中 $u_0(x)$ 在定解区域是二阶可导的,并且 $u_0(0) = a$,当自然边界条件是非齐次时,基函数的选取不受任何影响.

下面总结 Ritz 方法和 Galerkin 方法的优缺点:

① 关于基函数的选取,对于两点边值问题,基函数的选取相对比较容易,然而,对高维情况,除了规则的定解区域(比如长方形)外,子空间的基函数的选取是很困难的.

② 当取子空间的维数为 n 时,需要至少计算$\frac{n^2}{2}$次的积分才能求出 $a(\varphi_i, \varphi_j)$ 和 $L(\varphi_i)$,这是很大的计算量.

③ 如果按照例题中的传统方法选取基函数,当 n 比较大时,得到的方程组的系数矩阵的条件数也很大,此时,对方程组进行数值计算是不稳定的.

习　题

1. 求泛函 $J(y_1, y_2) = \int_a^b f(x, y_1, y_2, y_1', y_2')\mathrm{d}x$ 的一阶变分和二阶变分,并求它的 Eular 方程。

2. 求泛函 $J(u) = \iint_\Omega f(x, y, u, \nabla u)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ 的一阶变分,并求它的 Eular 方程。

3. 对于椭圆方程第一边值问题

$$-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial u}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial u}{\partial y}\right) + qu = f$$

$$u|_\Gamma = g$$

建立相应的最小势能原理和虚功原理。

4. 弹性梁的位移 $u(x)$ 满足边界条件 $u(0)=u(l)=0, u'(0)=u'(l)=0$，弹性梁的总势能为

$$J(u)=\frac{1}{2}\int_0^l (ku^2+EI\,(u'')^2+2fu)\mathrm{d}x$$

建立相应平衡位置方程和虚功原理。

5. 针对上题的总势能，推导出相应的 Ritz 形式和 Galerkin 形式的变分问题。

6. 轴对称的三维定常温度场 $u=u(r,z)$ 满足下面的方程和边界条件

$$\begin{cases}-(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial u}{\partial r})+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2})=f\\(-k\frac{\partial u}{\partial n}+\sigma u)\mid_{\partial\Omega}=g(r,z)\end{cases}$$

建立 Ritz 广义解和 Galerkin 广义解的变分问题。

第 7 章　有限元方法

上一章介绍了变分问题的两种近似求解的方法：Ritz 方法和 Galerkin 方法，并且指出了这两种方法存在的缺点：子空间如何选取，也即基函数的选取很困难，计算量很大等等. 本章所介绍的有限元方法是工程技术人员发展起来的，并由数学研究人员给出严格的数学基础. 它是变分问题与分片多项式相结合的产物. 但是它克服了上面两种变分近似法的缺点，在本质上作了很大的改进，使之成为求偏微分方程定解问题的一种很有效的数值计算方法. 目前它在结构力学、弹性力学和固体力学等方面得到很大的应用.

本章简单介绍有限元方法的一些基本思想和方法，首先从简单的两点边值问题入手，然后再介绍椭圆方程的有限元方法. 有限元方法求解偏微分方程定解问题的基本步骤可以归结为：

(1) 将微分方程定解问题转化为变分形式；

(2) 作网格剖分，即对定解区域作剖分，一维情况的单元是小区间，二维情况一般是三角形单元和四边形单元；

(3) 构造基函数或者单元形函数；

(4) 形成有限元方程；

(5) 求解有限元方程.

在此书中关注的是第(1) 步到第(4) 步. 为了很好的讨论有限元方法，首先介绍一些预备知识 ——Lagrange 插值函数.

7.1　插值函数

当精确函数 $y = f(x)$ 非常复杂或未知时，但能测量或者统计出在一列节点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ 处的函数值 $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \cdots, y_n = f(x_n)$. 根据这些已知条件，构造一个简单易算的近似函数 $\varphi(x)$，满足条件 $y_i = \varphi(x_i), i = 0, 1, \cdots, n$，这里的 $\varphi(x)$ 称为 $f(x)$ 的插值函数. $x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$ 称为插值节点.

下面的任务是如何求解此函数呢？很显然，最简单的是 n 次多项式函数. 因此，问题转化为：已知函数 $f(x)$ 在$[a,b]$上有 $n+1$ 个互异点 $x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$ 处的函数值，即 $y_i = f(x_i)$，求一个至多 n 次多项式函数

$$\varphi_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots a_n x^n,$$

使得 $y_i = \varphi_n(x_i)$. 利用待定系数法求解多项式的系数 $\{a_i\}_{i=0}^{i=n}$，得到如下方程组

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \cdots + a_n x_0^n = y_0, \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots + a_n x_1^n = y_1, \\ \cdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots + a_n x_n^n = y_n. \end{cases}$$

因为方程组的系数矩阵为范德蒙行列式，即可逆，于是方程组的解 $\{a_i\}$ 存在而且唯一，所以在 $n+1$ 个互异节点上的至多 n 次插值多项式存在而且唯一.

当插值节点的数量很大时，上面的方程求解起来并不是一件很容易的事情，计算量相当巨大. 因此，必须寻找一种简单易行的方法. 首先从节点个数较小开始，找出其中规律. 当 $n=1$ 时，此时的插值多项式是一次多项式 $\varphi_1(x) = a_0 + a_1 x$. 由待定系数法，得到

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 = y_0, \\ a_0 + a_1 x_1 = y_1, \end{cases}$$

求解方程组得 $\quad a_0 = \dfrac{y_1 x_0 - y_0 x_1}{x_0 - x_1}, a_1 = \dfrac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}.$

因此一次插值多项式为

$$\varphi_1(x) = \frac{y_1 x_0 - y_0 x_1}{x_0 - x_1} + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} x.$$

将上式改写为

$$\varphi_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

记 $\quad l_0(x) = \dfrac{x - x_1}{x_0 - x_1}, l_1(x) = \dfrac{x - x_0}{x_1 - x_0}$，则

$$\varphi_1(x) = y_0 l_0(x) + y_1 l_1(x).$$

很显然

$$l_0(x_0) = 1, l_0(x_1) = 0, l_1(x_0) = 0, l_1(x_1) = 1.$$

即 $l_i(x)(i=0,1)$ 在对应的插值节点 x_i 处的值为 1，当 $j \neq i$ 时，$l_i(x_j) = 0$，此时，称 $l_i(x)(i=0,1)$ 为插值节点 x_i 处的 Lagrange 基函数. 于是，一次插值多项式可以表述为节点处的 Lagrange 基函数的线性组合，并且其对应的系数是此节点处的函数值. 由此推广，当有 $n+1$ 个互异节点时，可以得到 n 次插值多项式. 只要构造出每个节点的 Lagrange 基函数 $l_j(x)$，它们满足

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

并且基函数 $l_j(x)$ 是 n 次多项式. 由上面的条件可知，$x_0, \cdots, x_{j-1}, x_{j+1}, \cdots, x_n$ 是 $l_j(x)$ 的 n 个根，则 $l_j(x)$ 可以写为

$$l_j(x) = c(x - x_0)\cdots(x - x_{j-1})(x - x_{j+1})\cdots(x - x_n),$$

再由 $l_j(x_j)=1$,求得常数

$$c=\frac{1}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)}.$$

因此,得到每个节点的基函数

$$l_j(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_n)}{(x_j-x_0)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_n)},\quad j=1,2,\cdots,n.$$

则在 $n+1$ 个互异节点的 n 次插值多项式为

$$\varphi_n(x)=\sum_{i=0}^{n}y_il_i(x).$$

7.2 两点边值问题的线性有限元方法

考虑两点边值问题

$$\begin{cases}-\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(p\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x})+qu=f, & x\in(a,b),\\ u(a)=0,\quad p(b)\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}(b)+\alpha u(b)=\varphi(x).\end{cases}$$

其中　$p\in C^1[a,b],q,f\in C[a,b],p\geqslant p_0>0,q\geqslant 0,\alpha\geqslant 0.$

第一步:将数学物理问题化为等价的变分问题.

令　$V=\{v\mid\int_a^b[(\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x})^2+v^2]\mathrm{d}x<+\infty,v(a)=0\}.$

变分问题:求 $u(x)\in V$,使 $a(u,v)=L(v),\quad\forall v\in V.$

其中　$a(u,v)=\int_a^b(p\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}+quv)\mathrm{d}x+\alpha u(b)v(b),$

$L(v)=\int_a^b fv\mathrm{d}x+gv(b).$

第二步:定解区域剖分.

对$[a,b]$进行剖分,使 $a=x_0<x_1<\cdots<x_N=b$,小区间 e_i 的长度 $h_i=x_i-x_{i-1}$,每一个小区间称为单元. 令 $h=\max\limits_i h_i$.

第三步:有限元空间的构造.

在上述剖分的基础上,构造 $L^2[a,b]$ 的有限维子空间 V_h,此子空间称为试探函数空间. 试探函数空间 V_h 应该满足如下要求:

(1) 子空间 V_h 中的任何元素(函数)限制在任意一个单元 e_i 上时,都是一次函数;

(2) 子空间 V_h 中的任何元素(函数)满足一定的光滑性,在$[a,b]$是连续函数;

(3) 子空间 V_h 中的任何元素(函数)$u_h(x)$ 在端点满足 $u_h(a)=0$.
设 $v_h(x)\in V_h$,因为在单元上 e_i 上时,是一次函数,根据上节插值多项式的结论有

$$v_h(x)\mid_{e_i} = v_h(x_{i-1})\frac{x_i - x}{h_i} + v_h(x_i)\frac{x - x_{i-1}}{h_i}, \qquad x\in e_i, i=1,2,\cdots,N.$$

因此,从几何图形角度来看,$v_h(x)$ 是一个分段线性函数,如图 7.1 所示.
根据试探函数的特点以及 Lagrange 插值,可以取如下形式的函数

$$l_0(x)=\begin{cases}\dfrac{x_1-x}{h_1}, & x_0\leqslant x<x_1,\\ 0, & x\geqslant x_1.\end{cases}$$

$$l_i(x)=\begin{cases}0 & x\leqslant x_{i-1},\\ \dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}, & x_{i-1}\leqslant x<x_i,\\ \dfrac{x_{i+1}-x}{h_{i+1}}, & x_i\leqslant x<x_{i+1},\\ 0, & x_{i+1}\leqslant x.\end{cases}$$

$$l_N(x)=\begin{cases}0, & x\leqslant x_{N+1},\\ \dfrac{x-x_{N-1}}{h_N}, & x_{N-1}\leqslant x\leqslant x_N.\end{cases}$$

很显然,上面所选取的函数满足

$$l_j(x_i)=\begin{cases}0, & i\neq j,\\ 1, & i=j.\end{cases}$$

并且它们是连续的分段线性函数,因此都属于子空间 V_h. 并且都具有局部非零性,因此也称为整体基函数. 它们的函数图像分别如图 7.2、图 7.3、图 7.4 所示.

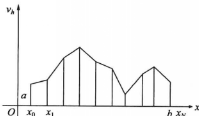


图 7.1

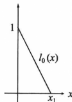


图 7.2

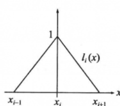


图 7.3

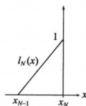


图 7.4

很容易验证 $l_i(x)$ 函数列是线性无关的,因为,令

$$c_0 l_0(x) + c_1 l_1(x) + \cdots + c_i l_i(x) + \cdots + c_N l_N(x) = 0,$$

取 $x = x_i$，代入上式，利用性函数的性质得

$$c_i l_i(x_i) = 0 \Rightarrow c_i = 0.$$

于是 $l_i(x)$ 函数列可以成为子空间 V_h 的基底. 因此 V_h 由 $l_i(x)$ 函数列张成，即

$$V_h = \mathrm{span}\{l_0(x), l_1(x), \cdots, l_N(x)\}, x \in [a,b].$$

称此空间为线性有限元空间.

所以 $\forall v_h \in V_h$，存在实数列 $v_0, v_1, \cdots, v_N$，使得

$$v_h(x) = v_0 l_0(x) + v_1 l_1(x) + \cdots + v_N l_N(x).$$

在上一章中，提到 Ritz 方法和 Galerkin 方法的很大缺陷，就是需要计算大量的积分，在进行数值计算时需要消耗大量的计算机的内存和时间. 下面讨论这样构造的子空间如何使计算更加简单，在计算机上容易编写程序实现.

做变换 $\xi = \dfrac{x - x_{i-1}}{h}$，

则此变换将单元 e_i 变换到区间[0,1]上，区间[0,1]称为参考单元.

令 $N_0(\xi) = \xi, N_1(\xi) = 1 - \xi$，称这两个函数为形函数.

则

$$l_0(x) = \begin{cases} N_1(\xi), & x_0 \leqslant x < x_1 \\ 0, & x \geqslant x_1. \end{cases} \qquad \text{其中 } \xi = \frac{x - x_0}{h}.$$

$$l_i(x) = \begin{cases} 0, & x \leqslant x_{i-1}, \\ N_0(\xi), & x_{i-1} \leqslant x < x_i, \text{其中 } \xi = \dfrac{x - x_{i-1}}{h}. \\ N_1(\xi), & x_i \leqslant x < x_{i+1}, \text{其中 } \xi = \dfrac{x - x_i}{h}. \\ 0, & x_{i+1} \leqslant x, \end{cases}$$

$$l_N(x) = \begin{cases} 0, & x \leqslant x_{N-1}, \\ N_0(\xi), & x_{N-1} \leqslant x \leqslant x_N, \end{cases} \qquad \text{其中 } \xi = \frac{x - x_N}{h}.$$

第四步：生成有限元方程.

因为 $C^1[a,b]$ 是无穷维的函数空间，在此空间求真解，一般来说，是很困难的. 但是，在空间 V_h 进行求解就容易多了. 用一个离散变分问题来近似原来的变分问题.

离散变分问题：求 $u_h(x) \in V_h$，使 $a(u_h, v_h) = L(v_h), \quad \forall v_h \in V_h$.

令 $u_h(x) = \sum\limits_{i=1}^{n} u_i^* l_i(x), v_h(x) = l_j(x)$，

由此得到

$$\sum_{i=1}^{n} a(l_i, l_j) u_i^* = L(l_j), \quad 1 \leqslant j \leqslant N.$$

写成矩阵形式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{f}$.

其中$\boldsymbol{A} = (a(l_i, l_j))_{N\times N}, \boldsymbol{u}^* = (u_1^*, u_2^*, \cdots, u_N^*)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{f} = (L(l_1), L(l_2), \cdots, L(l_N))^{\mathrm{T}}$,

称此线性代数方程组为有限元方程.

根据基函数的性质可知,当$|i-j| \geqslant 2$时,$l_i(x)l_j(x) = 0, l'_i(x)l'_j(x) = 0$. 因此,得到有限元的系数矩阵每行至多只有三个非零元素,即

$$a(l_{j-1}, l_j) = \int_{x_{j-1}}^{x_j} [pl'_{j-1}l'_j + ql_{j-1}l_j]\mathrm{d}x = \int_{x_{j-1}}^{x_j} [-ph_j^{-2} + ql_{j-1}l_j]\mathrm{d}x,$$

$$= \int_0^1 [-p(x_{j-1} + h_j\xi)h_j^{-1} + h_j q(x_{j-1} + h_j\xi)\xi(1-\xi)]\mathrm{d}\xi,$$

$$a(l_j, l_j) = \int_{x_{j-1}}^{x_j} [pl'_j l'_j + ql_j l_j]\mathrm{d}x + \int_{x_j}^{x_{j+1}} [pl'_j l'_j + ql_j l_j]\mathrm{d}x$$

$$= \int_{x_{j-1}}^{x_j} [ph_j^{-2} + ql_j l_j]\mathrm{d}x + \int_{x_{j-1}}^{x_j} [ph_{j+1}^{-2} + ql_j l_j]\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^1 [p(x_{j-1} + h_j\xi)h_j^{-1} + h_j q(x_{j-1} + h_j\xi)\xi^2]\mathrm{d}\xi$$

$$+ \int_0^1 [p(x_j + h_{j+1}\xi)h_{j+1}^{-1} + h_{j+1} q(x_j + h_{j+1}\xi)]\mathrm{d}\xi,$$

$$a(l_j, l_{j+1}) = \int_{x_j}^{x_{j+1}} [pl'_j l'_{j+1} + ql_j l_{j+1}]\mathrm{d}x = \int_{x_j}^{x_{j+1}} [-ph_{j+1}^{-2} + ql_j l_{j+1}]\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^1 [-p(x_j + h_{j+1}\xi)h_{j+1}^{-1} + h_{j+1} q(x_j + h_{j+1}\xi)\xi(1-\xi)]\mathrm{d}\xi,$$

$$a(l_N, l_N) = \int_{x_{N-1}}^{x_N} [pl'_N l'_N + ql_N l_N]\mathrm{d}x + \alpha p(1)$$

$$= \int_0^1 [p(x_j + h_{j+1}\xi)h_N^{-1} + h_N q(x_j + h_{j+1}\xi)\xi^2]\mathrm{d}x + \alpha p(1)u(x_N).$$

从上面的计算可以得到,在系数矩阵中,第一行的元素中只有前面两列存在非零元素,最后一行的元素中,最后两列存在非零元素. 右端项

$$L(l_j) = \int_{x_{j-1}}^{x_j} fl_j\mathrm{d}x + \int_{x_j}^{x_{j+1}} fl_j\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^1 f(x_{j-1} + h_j\xi)\xi h_j\mathrm{d}\zeta + \int_0^1 f(x_j + h_{j+1}\xi)(1-\xi)h_{j+1}\mathrm{d}\xi,$$

$$L(l_N) = \int_{x_{N-1}}^{b} fl_N\mathrm{d}x = \int_0^1 f(x_{N-1} + h_N\xi)(1-\xi)h_N\mathrm{d}x.$$

如果左边值条件为非齐次的,即 $u(a) = \beta$,

可设 $u_h(x)=\sum_{i=0}^{n}u_i^*l_i(x)=u_0^*l_0(x)+\sum_{i=1}^{n}u_i^*l_i(x)$,

则得到有限元方程

$$\beta a(l_0,l_j)+\sum_{i=1}^{n}a(l_i,l_j)u_i^*=L(l_j),\qquad 1\leqslant j\leqslant N,$$

即

$$\sum_{i=1}^{n}a(l_i,l_j)u_i^*=L(l_j)-\beta a(l_0,l_j),\qquad 1\leqslant j\leqslant N.$$

根据基函数的性质,实际上,只是修改了第一个方程的右端,其余的保持不变.

在实际的工程计算中,并不是按照上面的方法构造有限元方程,而是先分析每个单元上的有限元方程,然后合成得到在整个区间上的有限元方程. 称单元上得到的系数矩阵为单元刚度阵. 整个区间上的有限元方程的系数矩阵称为总刚度阵. 由刚度阵分析得到有限元方程的方法很灵活,特别是程序上容易实现,计算量小. 考虑在第 i 个单元$[x_{i-1},x_i]$计算单元刚度阵. 它是 u_{i-1},u_i 的二次型,写成

$$(\boldsymbol{u}^{(i)})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}^{(i)}\boldsymbol{u}^{(i)},$$

其中

$$\boldsymbol{u}^{(i)}=(u_{i-1},u_i)^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{K}^{(i)}=\begin{pmatrix}a_{i-1,i-1}^{(i)} & a_{i-1,i}^{(i)}\\ a_{i,i-1}^{(i)} & a_{i,i}^{(i)}\end{pmatrix}\text{是单元刚度阵.}$$

其中单元刚度阵中的元素为

$$a_{i-1,i-1}^{(i)}=a(l_{i-1},l_{i-1})=\int_0^1\left[p(x_{i-2}+h_{i-1}\xi)h_{i-1}^{-1}+h_{i-1}q(x_{i-2}+h_{i-1}\xi)\,(1-\xi)^2\right]\mathrm{d}\xi,$$

$$a_{i,i}^{(i)}=a(l_i,l_i)=\int_0^1\left[p(x_{i-1}+h_i\xi)h_i^{-1}+h_iq(x_{i-1}+h_i\xi)\xi^2\,\mathrm{d}\xi\right]$$

$$a_{i-1,i}^{(i)}=a_{i,i-1}^{(i)}=a(l_{i-1},l_i)=\int_0^1\left[-p(x_{i-1}+h_i\xi)h_i^{-1}+h_jq(x_{i-1}+h_i\xi)\xi(1-\xi)\,\mathrm{d}\xi\right]$$

把单元刚度矩阵 $\boldsymbol{K}^{(i)}$ 扩充为 n 阶方阵,n 阶方阵的第 $i,i-1$ 行和第 $i,i-1$ 列交叉位置的元分别就是 $a_{i-1,i-1}^{(i)},a_{i-1,i}^{(i)},a_{i,i-1}^{(i)}$ 和 $a_{i,i}^{(i)}$,其余元素是 0,即

$$\boldsymbol{K}^{(i)}=\begin{pmatrix}0 &&&&&& \\ & \ddots &&&&& \\ && 0 &&&& \\ &&& a_{i-1,i-1}^{(i)} & a_{i-1,i}^{(i)} && \\ &&& a_{i,i-1}^{(i)} & a_{i,i}^{(i)} && \\ &&&& 0 && \\ &&&&& \ddots & \\ &&&&&& 0\end{pmatrix}.$$

还可以把单位荷载向量进行类似地扩充得到

$$\boldsymbol{f}^{(i)} = (0,\cdots,0,f_1^{(i)},f_2^{(i)},0,\cdots,0)^{\mathrm{T}},$$

记　$\boldsymbol{u} = (u_1,u_2,\cdots,u_{n-1},u_n)^{\mathrm{T}}$,

$$\boldsymbol{K} = \sum_{i=1}^{n-1} K^{(i)},\quad \boldsymbol{F} = \sum_{i=1}^{n-1} f^{(i)}.$$

于是得到在整个定解区域上的有限元方程

$$\boldsymbol{Ku} = \boldsymbol{F},$$

其中 K 为总刚度矩阵,F 总荷载向量.

算例 1:用线性有限元方法求解微分方程的数值解

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} - \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + u = \mathrm{e}^x - 3\sin x, \\ u(0) = -2, u(\pi) = \mathrm{e}^\pi + 3. \end{cases}$$

下面是进行10个单元剖分时,在节点的有限元解 u 和真值 U,解析解曲线以及误差曲线分别如图 7.5.图 7.6 所示.

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
u	−2.000	−1.458	−0.498	0.887	2.697	4.940	7.652	10.914	14.883	19.821	26.141
U	−2.000	−1.484	−0.553	0.803	2.587	4.811	7.513	10.78	14.772	19.755	26.141

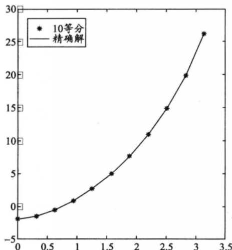


图 7.5　精确解曲线和近似解

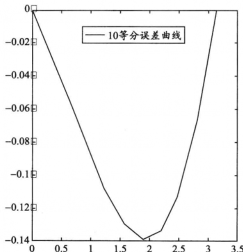


图 7.6　误差曲线

下面是进行 50 个单元剖分时，在节点的有限元解和真值，解析解曲线以及误差曲线分别如图 7.7、图 7.8 所示.

节点近似解的值

u = [−2.0000 −1.9290 −1.8421 −1.7388 −1.6192 −1.4830 −1.3302 −1.1606
−0.9741 −0.7708 −0.5504 −0.3132 −0.0588 0.2125 0.5008 0.8063 1.1288
1.4684 1.8253 2.1994 2.5909 2.9999 3.4266 3.8712 4.3341 4.8156
5.3160 5.8359 6.3758 6.9365 7.5186 8.1230 8.7507 9.4029 10.0807
10.7856 11.5192 12.2830 13.0791 13.9096 14.7767 15.6829 16.6310
17.6240 18.6651 19.7578 20.9060 22.1137 23.3855 24.7261 26.1407]

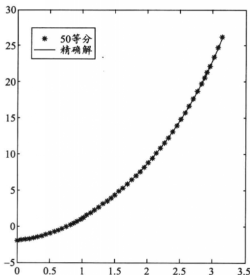


图 7.7 精确解曲线和近似解

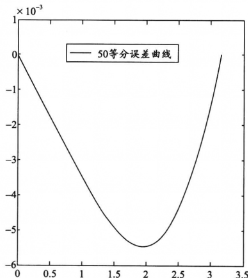


图 7.8 误差曲线

7.3 一维高次有限元

根据理论的误差分析，可以知道，上节所讨论的一次元的误差是 $O(h^2)$，有时候为了提高有限元的精度，需要增加试探函数空间 V_h 的维数. 有两种方法提高试探函数空间的维数，一是增加节点的个数(即加密网格)，另外一种方法是提高插值多项式的次数，也即高次有限元. 此节重点讨论二次有限元，要求在每一个单元上是二次多项式，在单元的节点处连续.

仿照一次有限元的方法，当在单元$[x_{i-1}, x_i]$上进行一次插值时，构造一次多项式 $ax+b$，有两个自由度(未知量 a, b)，需要两个插值条件，所以给定两个端点的值. 当在单元$[x_{i-1}, x_i]$上进行二次插值时，构造二次多项式 ax^2+bx+c，是三个自由度(未知量 a, b 和 c)，此时需要三个插值条件. 两个端点对应的函数值不能完全确定三个自由度，还需要另外一个条件. 为此，我们取单元中点对应的函数值，这样在每个单元中点上增设了一个条件. 于是就可以在单元$[x_{i-1}, x_i]$构造 Lagrange 插值基函数. 为此，首先在[0,1]区间上构造二次 Lagrange 插值基函数 $L_0(\xi)$, $L_{1/2}(\xi)$ 和 $L_1(\xi)$.

首先考虑$L_0(\xi)$，$L_0(\xi)$ 满足插值条件

$$L_0(0)=1, L_0\left(\frac{1}{2}\right)=0, L_0(1)=0.$$

由根与因子的关系，显然， $L_0(\xi)$ 的表达式为 $L_0(\xi)=c(1-\xi)\left(\frac{1}{2}-\xi\right)$.

再由　$L_0(0)=1$ 得到 $c=2$. 即

$$L_0(\xi)=2(1-\xi)\left(\frac{1}{2}-\xi\right)=(1-\xi)(1-2\xi).$$

令变换　$\xi=\frac{x-x_{i-1}}{h_i}$，即 $x_{i-1}\to 0, x_i\to 1$.

得到　$L_0(x)=\left(1-\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\right)\left(1-2\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\right)$.

再考虑$L_{1/2}(\xi)$，$L_{1/2}(\xi)$ 满足插值条件

$$L_{1/2}(0)=L_{1/2}(1)=0, L_{1/2}\left(\frac{1}{2}\right)=1,$$

则有　$L_{1/2}(\xi)=4\xi(1-\xi)$,

$$L_{1/2}(x)=4\times\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\left(1-\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\right),$$

同理得到　$L_1(\xi)=\xi(2\xi-1)$，也即 $L_1(x)=\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\left(2\times\frac{x-x_{i-1}}{h_i}-1\right)$，它们的图形分别如图 7.9、图 7.10、图 7.11 所示.

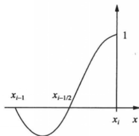


图 7.9

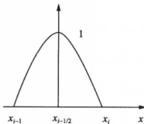


图 7.10

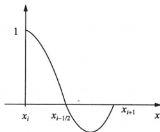


图 7.11

由此得到单元的 Lagrange 基函数，下面构造在整个定解区域上的整体基函数. 考虑节点 x_i，因为节点 x_i 是单元$[x_{i-1},x_i]$和$[x_i,x_{i+1}]$的共同的端点. 在不同的单元，两者的 Lagrange 基函数是不一样的. 因为在单元$[x_{i-1},x_i]$上的变换是 $\xi=\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}$，将 $x_i\to 1$，而在单元$[x_i,x_{i+1}]$上的变换是 $\xi=\dfrac{x-x_i}{h_i}$，将 $x_i\to 0$. 于是在不同单元上的 Lagrange 基函数不同，只要将相邻两个单元上的 Lagrange 基函数拼接起来得到在节点 x_i 的整体基函数. 如下

$$\varphi_i(x)=\begin{cases}\left(1-\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}\right)\left(1-2\,\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}\right), & x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i,\\ \dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}\left(2\times\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}-1\right), & x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i,\\ 0, & 其他.\end{cases}$$

而单元中点的整体基函数就是在此单元上是 Lagrange 基函数，而在此单元外等于零的分段函数，即

$$\varphi_{i+\frac{1}{2}}(x)=\begin{cases}4\times\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}\left(1-\dfrac{x-x_{i-1}}{h_i}\right), & x_{i-1}\leqslant x\leqslant x_i,\\ 0, & 其他.\end{cases}$$

$\varphi_i(x)$ 和 $\varphi_{i+\frac{1}{2}}(x)$ 的形状分别如图 7.12、图 7.13 所示.

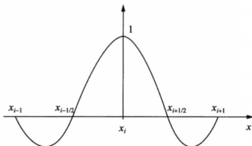


图 7.12

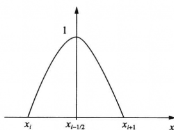


图 7.13

因此，二次有限元的近似解可以表示为

$$u_h(x)=\sum_{i=0}^{n}u_i\varphi_i(x)+\sum_{i=1}^{n}u_{i-\frac{1}{2}}\varphi_{i-\frac{1}{2}}(x).$$

很显然，在每个单元上，近似解是二次多项式，在节点处连续. 因此，在整个定解区域近似解是连续函数.

7.4　二维椭圆边值问题的有限元方法

1. 考虑二维椭圆边值问题

$$\begin{cases}-\Delta u = f, & (x,y) \in \Omega, \\ u = 0, & (x,y) \in \partial\Omega.\end{cases}$$

第一步:将数学物理问题化为等价的变分问题.

令　$C_0^1(\Omega) = \{v \mid \iint_\Omega [(\nabla v)^2 + v^2]\mathrm{d}x\mathrm{d}y < \infty, v|_{\partial\Omega} = 0\}$,

变分问题:求 $u(x) \in C_0^1(\Omega)$,使 $a(u,v) = L(v)$, $\forall v \in C_0^1(\Omega)$　(1)

其中

$$a(u,v) = \iint_\Omega [\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\frac{\partial v}{\partial y}]\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \iint_\Omega \nabla u \nabla v \mathrm{d}x\mathrm{d}y, \quad L(v) = \int_a^b fv\mathrm{d}x.$$

第二步:定解区域剖分

在二维空间中,区域剖分的方法基本是三角形剖分和四边形剖分,四边形剖分基本使用的是矩形剖分.本节着重介绍三角形剖分,在下一节中讨论有关四边形剖分.三角形剖分就是将定解区域分割为有限个小三角形单元.

设定解区域 Ω 的边界 $\Gamma = \partial\Omega$ 分片光滑,如果不是由直折线段组成,那么采取截弯取直的办法,用适当的折线段 Γ_h 逼近 Γ,用 Ω_h 近似 Ω.三角形的顶点称为节点,记为 $P_i(x_i, y_i)$, $1 \leqslant i \leqslant N_P$.每一个三角形称为单元,记为 e_k, $1 \leqslant k \leqslant N_e$.三角形剖分必须注意如下几点,即三角形剖分必须是正则的.

(1) 每个单元的顶点必须是另外一个单元的顶点,不能是相邻单元的边上的点.原因是方便构造插值函数;

(2) 三角形之间内部无重叠,即 $\overset{o}{e}_i \cap \overset{o}{e}_j = \phi, i \neq j, 1 \leqslant i, j \leqslant N_e$;

(3) 在剖分过程中尽量避免大钝角三角形,即要求满足如下不等式

$$c_1 \leqslant \frac{h_i}{\rho_i} \leqslant c_2,$$

其中 c_1, c_2 是正常数,h_i 是第 i 个单元的最大边长,ρ_i 第 i 个单元的外接圆的直径;

(4) 如果方程的系数在区域内部是间断的,则用折线近似间断线,而且这些折线必须是三角形单元的边界;

(5) 如果定解区域的边界是由有限条光滑曲线组成的,则这些光滑曲线的交点也必须是节点,如果在边界条件中的系数也是间断的.则间断点也必须是节点;

(6) 对于任何一个单元,单元最多有两个顶点落在边界上.

注:① 三角剖分具有很好的灵活性和适应性. 一般的定解区域很容易满足正则剖分. 另外,根据实际情况的需要来安排节点的位置,比如,对扳手进行受力分析,在应力或者位移变化较大的区域,可以适当增加单元的个数,即加密节点,然而,在应力或者位移变化平缓的区域,可以适当减少单元的个数,即设置较少的节点.

② 区域剖分好后,必须对节点和单元编号,一般来说,编号顺序可以是任意的. 但是编号的顺序会直接影响有限元方程组的系数矩阵的结构. 因为在求解有限元方程组时一般采用数值解法,这样,系数矩阵的结构会影响计算的速度和计算量. 另外,根据不同的数值算法,还会影响计算机的存储量.

③ 通过以上的三角剖分和分片线性插值,已经构造出了一个有限维的子空间 V_h. 但是,当定解区域不是直多边形时,由于对定解区域的边界截弯取直,所得到的区域 Ω_h 不等于 Ω,所以子空间 V_h 不是真解空间的子空间. 在本书中,对此不做讨论,我们都假设 Ω_h 等于 Ω.

第三步:有限元空间的构造

在上述剖分的基础上,构造 $L^2(\Omega)$ 的有限维子空间 V_h. 即为有限元函数空间. V_h 应该满足如下要求:

① 子空间 V_h 中的任何元素(函数)限制在任意一个单元 e_i 上时,都是一次函数;

② 子空间 V_h 中的任何元素(函数)满足一定的光滑性,在 Ω 是连续函数;

③ 子空间 V_h 中的任何元素(函数)$v_n(x)$ 在边界上满足 $v_n(x,y)=0$,

即 $V_h=\{v_h(x,y)\mid v_h(x,y)\in C(\Omega), v_h(x,y)|_e\in P_1(x,y), v_h(x,y)=0$,

其中 $P_1(x,y)$ 是一次多项式.

下面构造形函数 $N_i(x,y)$(编号为 i 的节点的形函数),形函数 $N_i(x,y)$ 必须满足以下条件:

① 在单元 e 上时,是一次函数.

② 设 $P_j,(j=1,2,\cdots,M)$ 是单元 e 上的某个顶点(也即节点),每个节点都对应一个形函数,并且满足 $N_i(P_j)=\delta_{ij}$,其中 M 是单元上节点个数的总数. 例如,三角线性单元,节点总数是 3.

③ 单元之外,每个形函数都等于 0.

由于是三角线性有限元,单元节点的个数是 3,因此单元每个节点的自由度是 1,即只要给定在每个节点的函数值. 就定解区域的整体剖分而言,在节点 P_i 处确立了一个整体基函数,它是以节点 P_i 为顶点的所有单元上的节点形函数拼接而成的,它是分片线性的,而且局部非零的. 它满足条件 $\varphi_i(P_j)=\delta_{ij}$,$(i,j=1,2,\cdots,N)$,其中 N 定解区域上的节点的总数. 其图形如图 7.14 所示:

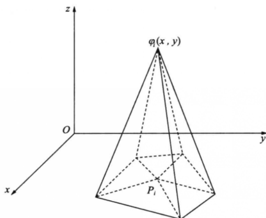


图 7.14

每个节点对应一个相应的基函数，由这些基函数$\{\varphi_i\}(i=1,2,\cdots,N)$很容易构造出分片线性的，而且在整个定解区域上连续的函数集合，即有限元空间V_h. 并且可以证明在正则剖分的情况下，有限元空间$V_h=\mathrm{span}\{\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_N\}$在网格步长$h\to 0$时，有限元空间收敛到广义解空间. 因为$\{\varphi_i\}(i=1,2,\cdots,N)$是线性无关的，所以它是有限元空间的一组基底. 则对任何$u_h\in V_h$，有

$$u_h(x,y)=\sum_{i=1}^{N}u_i\varphi_i(x,y).$$

第四步：形成有限元方程.

为了讨论的方便，假设微分方程的边界条件为齐次边界条件，即$u(x,y)\mid_\Gamma=0$.

令$u_h(x,y)=\sum\limits_{i=1}^{N}u_i\varphi_i(x,y)$，$v_h(x,y)=\sum\limits_{i=1}^{N}v_i\varphi_i(x,y)$，代入(1)得

$$a(u_h,v_h)=F(v_h)\Rightarrow\sum_{i=1}^{N}a(\varphi_i,\varphi_j)u_i=F(\varphi_j),j=1,2,\cdots,N. \tag{2}$$

其中

$$a(\varphi_i,\varphi_j)=\iint_{\Omega_h}\left[\frac{\partial\varphi_i}{\partial x}\frac{\partial\varphi_j}{\partial x}+\frac{\partial\varphi_i}{\partial y}\frac{\partial\varphi_j}{\partial y}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$$

$$F(\varphi_j)=\int_{\Omega_h}f\varphi_j\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

将方程组(2)改写为矩阵的形式为　$\boldsymbol{KU}=\boldsymbol{F}$,

其中

$$K=\begin{pmatrix} a(\varphi_1,\varphi_1) & a(\varphi_2,\varphi_1) & \cdots & a(\varphi_N,\varphi_1) \\ a(\varphi_1,\varphi_2) & a(\varphi_2,\varphi_2) & \cdots & a(\varphi_N,\varphi_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a(\varphi_1,\varphi_N) & a(\varphi_2,\varphi_N) & \cdots & a(\varphi_N,\varphi_N) \end{pmatrix}, U=\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, F=\begin{pmatrix} F(\varphi_1) \\ F(\varphi_2) \\ \vdots \\ F(\varphi_N) \end{pmatrix}.$$

矩阵 $\boldsymbol{K}$ 称为总刚度阵，$\boldsymbol{U}$ 称为位移向量，$\boldsymbol{F}$ 称为总荷载向量.

在实际的计算中，一般不是上面讨论的那样计算出总刚度阵，否则无法体现有限元计算量少而简洁的优点了，而是采取的是每个单元的进行计算，然后合成总刚度阵.

把在 Ω_h 上的积分化为在单元上的积分再求和，于是(1) 可改写为

$$\sum_e \iint_e \left(\frac{\partial u_h}{\partial x}\frac{\partial v_h}{\partial x}+\frac{\partial u_h}{\partial y}\frac{\partial v_h}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\sum_e \iint_e f v_h \mathrm{d}x\mathrm{d}y, \quad \forall v_h \in V_h. \tag{3}$$

从上式可以看出，上式的积分都是在每一个单元上进行计算的，于是我们计算出每个单元的积分值就可以了，这就是单元分析的内容.

2. 在讲述单元分析之前，引入一个新的概念 —— 面积坐标

在任意单元三角形 ΔABC，考虑在此单元上的 Lagrange 线性插值. 即函数形式 $u(x,y)=ax+by+c$，很显然有三个未知量，需要三个条件来确定这三个未知量，于是给定单元三个顶点的函数值. 首先，考虑在三角形上的 Lagrange 基函数，即 $L_A(x,y)$，$L_B(x,y)$ 和 $L_C(x,y)$. 以 $L_A(x,y)$ 为例说明. 因为 $L_A(x,y)$ 是 Lagrange 基函数，则 $L_A(x,y)$ 满足

$$L_A(A)=1, L_A(B)=0, L_A(C)=0.$$

假设单元三角形的坐标为 $A(x_1,y_1)$，$B(x_2,y_2)$，$C(x_3,y_3)$，单元上的 Lagrange 基函数 $L_A(x,y)=ax+by+c$，并利用待定系数法得

$$\begin{cases} L_A(A)=ax_1+by_1+c=1, \\ L_A(B)=ax_2+by_2+c=0, \\ L_A(C)=ax_3+by_3+c=0. \end{cases} \tag{4}$$

另外假设三角形三顶点 A,B,C 是逆时针顺序排列的，则三角形的面积与上述方程组系数矩阵之间的关系为

$$S_{ABC}=\frac{1}{2}\begin{vmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{vmatrix}.$$

于是由 Gramme 法则，求解方程组(4)，

$$a=\frac{y_2-y_3}{2S_{ABC}}, \qquad b=-\frac{x_2-x_3}{2S_{ABC}}, \qquad c=\frac{x_2y_3-x_2y_2}{2S_{ABC}},$$

则

$$L_A(x,y)=\frac{y_2-y_3}{2S_{ABC}}x-\frac{x_2-x_3}{2S_{ABC}}y+\frac{x_2y_3-x_3y_2}{2S_{ABC}}$$

$$=\frac{1}{2S_{ABC}}(xy_2-xy_3-x_2y+x_3y+x_2y_3-x_3y_2).$$

根据行列式展开规则有

$$xy_2-xy_3-x_2y-x_3y+x_2y_3-x_3y_2=\begin{vmatrix} x & y & 1\\ x_2 & y_2 & 1\\ x_3 & y_3 & 1\end{vmatrix}.$$

又设点 $P(x,y)$ 为单元三角形内部任意点，ΔPBC 的面积为

$$S_{PBC}=\frac{1}{2}\begin{vmatrix} x & y & 1\\ x_2 & y_2 & 1\\ x_3 & y_3 & 1\end{vmatrix}.$$

可得

$$L_A(x,y)=\frac{2S_{PBC}}{2S_{ABC}}=\frac{S_{PBC}}{S_{ABC}},\quad \text{即 } L_A(x,y)=\frac{S_{PBC}}{S_{ABC}}.$$

同理可得其他两点的 Lagrange 插值基函数

$$L_B(x,y)=\frac{S_{PAC}}{S_{ABC}},\qquad L_C(x,y)=\frac{S_{PAB}}{S_{ABC}}.$$

由上面三式可见，在三角单元上进行插值，得到的 Lagrange 基函数是与面积有关的.

如果令

$$\lambda_1=L_A(x,y)=\frac{S_{PBC}}{S_{ABC}},\quad \lambda_2=L_B(x,y)=\frac{S_{PAC}}{S_{ABC}},\quad \lambda_3=L_A(x,y)=\frac{S_{APB}}{S_{ABC}},\tag{5}$$

显然$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$具有如下性质：

① 都是点 $P(x,y)$ 坐标的一次多项式函数；

② 是非负的，即 $\lambda\geqslant 0, i=1,2,3$；

③ $\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=1$.

假设点 $P(x,y)$ 是单元三角形内部的任意给定的点，由上面的讨论显然有，可以唯一确定$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$三重数. 相反地，如果给定满足上面性质(2)(3)的三重数$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$，也可以唯一的确定点 $P(x,y)$ 在三角单元中的位置. 则$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$与$(x,y)$是一一对应的. 因此可以将$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$作为平面内某点的坐标，称此坐标为面积坐标或者重心坐标或者齐次坐标.

面积坐标的其他性质

④ 单元三个顶点的坐标分别是$(1,0,0)$，$(0,1,0)$，$(0,0,1)$，重心坐标是$\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)$；

⑤ 单元三条边的方程分别是 $\lambda_1=0,\lambda_2=0,\lambda_3=0$；

⑥ 过三角形内任意一点作平行于三边中任一条的直线，此直线方程在面积坐标的表示为

$$\lambda_1 = \text{Const} \text{ 或者 } \lambda_2 = \text{Const} \text{ 或者 } \lambda_3 = \text{Const};$$

⑦ 任何一个关于 x,y 的 k 次多项式，通过变换(5)变为关于 $\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3$ 的齐 k 次多项式. 反之亦然.

3. 下面讨论面积坐标与直角坐标之间的关系

因为 $\lambda_1+\lambda_2+\lambda_3=1$，所以三重数$(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$只有两个独立的变量，第三个依赖另外两个变量的取值.

$$\lambda_1 = \frac{S_{PBC}}{S_{ABC}} = \frac{1}{S_{ABC}}(xy_2 - xy_3 - x_2y + x_3y + x_2y_3 - x_3y_2) = \frac{1}{S_{ABC}}(a_1x + b_1y + c_1), \tag{6}$$

$$\lambda_2 = \frac{S_{PAC}}{S_{ABC}} = \frac{1}{S_{ABC}}(xy_3 - xy_1 - x_3y + x_1y + x_3y_1 - x_1y_3) = \frac{1}{S_{ABC}}(a_2x + b_2y + c_2), \tag{7}$$

$$\lambda_3 = \frac{S_{APB}}{S_{ABC}} = \frac{1}{S_{ABC}}(xy_1 - xy_2 - x_2y + x_1y + x_1y_2 - x_2y_1) = \frac{1}{S_{ABC}}(a_3x + b_3y + c_3), \tag{8}$$

其中

$$\begin{cases} a_1 = \begin{vmatrix} y_2 & 1 \\ y_3 & 1 \end{vmatrix}, & a_2 = \begin{vmatrix} y_3 & 1 \\ y_1 & 1 \end{vmatrix}, & a_3 = \begin{vmatrix} y_1 & 1 \\ y_2 & 1 \end{vmatrix}, \\ b_1 = \begin{vmatrix} x_3 & 1 \\ x_2 & 1 \end{vmatrix}, & b_2 = \begin{vmatrix} x_1 & 1 \\ x_3 & 1 \end{vmatrix}, & b_3 = \begin{vmatrix} x_2 & 1 \\ x_1 & 1 \end{vmatrix}, \\ c_1 = \begin{vmatrix} x_2 & y_2 \\ x_3 & y_3 \end{vmatrix}, & c_2 = \begin{vmatrix} x_3 & y_3 \\ x_1 & y_1 \end{vmatrix}, & c_3 = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix}. \end{cases}$$

从而可得

$$\begin{cases} x_1\lambda_1 + x_2\lambda_2 + x_3\lambda_3 = x, \\ y_1\lambda_1 + y_2\lambda_2 + y_3\lambda_3 = y, \end{cases}$$

即
$$\begin{cases} x = (x_1 - x_3)\lambda_1 + (x_2 - x_3)\lambda_2 + x_3, \\ y = (y_1 - y_3)\lambda_1 + (y_2 - y_3)\lambda_2 + y_3. \end{cases} \tag{9}$$

如果取 λ_1,λ_2 为独立变量，则

$$\frac{\partial\lambda_1}{\partial x} = \frac{a_1}{2S_{ABC}}, \qquad \frac{\partial\lambda_1}{\partial x} = \frac{b_1}{2S_{ABC}},$$

$$\frac{\partial\lambda_2}{\partial x} = \frac{a_2}{2S_{ABC}}, \qquad \frac{\partial\lambda_2}{\partial x} = \frac{b_2}{2S_{ABC}}.$$

如果令 $\xi=\lambda_1,\eta=\lambda_2$，则(9)定义了一个仿射变换，把直角坐标系下的任意三角形变换为面积坐标系下的标准等腰直角三角形. 如图 7.15 所示

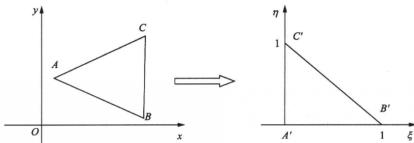


图 7.15

此变换的 Jacobi 行列式

$$J=\left|\frac{\partial(x,y)}{\partial(\xi,\eta)}\right|=\begin{vmatrix}x_1-x_3 & x_2-x_3\\ y_1-y_3 & y_2-y_3\end{vmatrix}=2S_{ABC}.$$

在做单元分析时，需要计算大量的积分，而且被积函数是多项式. 把被积函数的积分变量变为面积坐标表示，给积分的计算带来很大的简便. 因为

$$\begin{aligned}\iint_e \lambda_1{}^m\lambda_2{}^n\lambda_3{}^p\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y &= 2\iint_e \lambda_1{}^m\lambda_2{}^n\lambda_3{}^p\Delta_e\mathrm{d}\lambda_1\mathrm{d}\lambda_2\\ &= 2\Delta_e\iint_e \lambda_1{}^m\lambda_2{}^n(1-\lambda_1-\lambda_2)^p\mathrm{d}\lambda_1\mathrm{d}\lambda_2\\ &= 2\Delta_e\iint_e \lambda_1{}^m t^n(1-\lambda_1)^{n+p+1}(1-t)^p\mathrm{d}\lambda_1\mathrm{d}\lambda t\\ &= \int_0^1\lambda_1^m(1-\lambda_1)^{n+p+1}\mathrm{d}\lambda_1\int_0^1 t^n(1-\lambda t)^p\mathrm{d}t.\end{aligned}$$

再利用 Eular 公式

$$\int_0^1 t^n\,(1-\lambda t)^p\mathrm{d}t=\frac{n!p!}{(n+p+1)!},$$

由此得到

$$\iint_e \lambda_1{}^m\lambda_2{}^n\lambda_3{}^p\,\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{m!n!p!}{(m+n+p+2)!}.$$

单元分析

任取一单元 $e=\Delta P_iP_jP_m$，设函数 $u_h(x,y)$ 在节点 P_i 的值是 u_i，因为 $u_h(x,y)$ 在每个单元是线性函数，则 $u_h(x,y)$ 可以表示为

$$u_h(x,y)=u_i\lambda_i+u_j\lambda_j+u_m\lambda_m,$$
$$v_h(x,y)=v_i\lambda_i+v_j\lambda_j+v_m\lambda_m,$$

其中 $\lambda_i,\lambda_j,\lambda_m$ 是面积坐标，也分别是节点 P_i,P_j,P_m 在单元 e 所对应的形函数.

因此由(6)(7)(8) 可得

$$\frac{\partial u_h}{\partial x}=\frac{\partial\lambda_i}{\partial x}u_i+\frac{\partial\lambda_j}{\partial x}u_j+\frac{\partial\lambda_m}{\partial x}u_m=\frac{1}{2S_e}(a_iu_i+a_ju_j+a_mu_m),$$

同理可得

$$\frac{\partial u_h}{\partial y}=\frac{1}{2S_e}(b_iu_i+b_ju_j+b_mu_m).$$

为了书写的简洁和方便,引入如下矩阵和向量的记法

$$[\boldsymbol{B}]_e=\begin{bmatrix}\frac{\partial\lambda_i}{\partial x} & \frac{\partial\lambda_j}{\partial x} & \frac{\partial\lambda_m}{\partial x}\\ \frac{\partial\lambda_i}{\partial y} & \frac{\partial\lambda_j}{\partial y} & \frac{\partial\lambda_m}{\partial y}\end{bmatrix}=\frac{1}{2\boldsymbol{S}_e}\begin{pmatrix}a_i & a_j & a_m\\ b_i & b_j & b_m\end{pmatrix}$$

$$[\boldsymbol{\lambda}]_e=[\lambda_i,\lambda_j,\lambda_m]_{1\times3},\qquad\{\boldsymbol{u}\}_e=\{u_i,u_j,u_m\}^{\mathrm{T}},\qquad\{\boldsymbol{v}\}_e=\{v_i,v_j,v_m\}^{\mathrm{T}}.$$

则有 $\nabla u_{h_e}=\left(\frac{\partial u_h}{\partial x}\Big|_e\frac{\partial u_h}{\partial y}\Big|_e\right)^{\mathrm{T}}=[\boldsymbol{B}]\{u_h\}_e,$

$$\nabla v_{h_e}=\left(\frac{\partial v_h}{\partial x}\Big|_e\frac{\partial v_h}{\partial y}\Big|_e\right)^{\mathrm{T}}=[\boldsymbol{B}]\{v_h\}_e.$$

于是

$$\begin{aligned}\sum_e\iint_e\nabla u_h\nabla v_h\mathrm{d}x\mathrm{d}y&=\sum_e\iint_e\{\nabla v_n\}^{\mathrm{T}}\{\nabla u_h\}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=\sum_e\iint_e\{v_h\}_e^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{B}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{B}]\{u_h\}_e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=\sum_e\{v_h\}_e^{\mathrm{T}}[\overline{\boldsymbol{k}}]_e\{u_h\}_e=\sum_e\iint_e f\lambda^{\mathrm{T}}\{v_h\}^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\sum_e f_e{}^{\mathrm{T}}\{v_h\}^e.\end{aligned}$$

其中

$$[\overline{\boldsymbol{k}}]_e=\sum_e\iint_e[\boldsymbol{B}]^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{B}]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\qquad f_e^{\mathrm{T}}=\iint_e f\lambda^{\mathrm{T}}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

称$[\overline{\boldsymbol{k}}]_e$为单元刚度矩阵,称$f_e^{\mathrm{T}}$为单元荷载向量.

4. 与一维情形类似,需要把三阶方阵和三维向量扩充为N阶方阵和N维向量,但与一维情形也有不同的地方,因为在二维平面中.单元的顶点的编号一般不是相邻的,此时,扩充后的矩阵中的非零元素是根据单元的顶点的编号来确定的.

设$u_h(x,y)$和$v_h(x,y)$在节点P_i的函数值分别为u_i和v_i,记为向量形式

$$\{\boldsymbol{u}\}=(u_1,u_2,\cdots,u_N)^{\mathrm{T}},\{\boldsymbol{v}\}=(v_1,v_2,\cdots,v_N)^{\mathrm{T}},$$

不妨假设所有单元的顶点是按逆时针方向从小到大编号,即$e=\Delta P_iP_jP_m,i<j<m$,计算后得到

$$\{\boldsymbol{v}_h\}_e^{\mathrm{T}}[\overline{\boldsymbol{k}}]_e\{\boldsymbol{u}_h\}_e=(u_i,u_j,u_m)^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}k_{ii}^e & k_{ij}^e & k_{im}^e\\ k_{ji}^e & k_{jj}^e & k_{ii}^e\\ k_{mi}^e & k_{mj}^e & k_{mm}^e\end{bmatrix}\begin{pmatrix}v_i\\ v_j\\ v_m\end{pmatrix},$$

即单元刚度阵为

$$[\boldsymbol{k}]^e = \begin{bmatrix} k_{ii}^e & k_{ij}^e & k_{im}^e \\ k_{ji}^e & k_{jj}^e & k_{ii}^e \\ k_{mi}^e & k_{mj}^e & k_{mm}^e \end{bmatrix}.$$

做如下扩充，将单元刚度阵中的九个元素分布在扩充后矩阵的第 i,j,m 行和第 i,j,m 列的交叉的位置上，其他元素都是零. 即

$$[\boldsymbol{K}]^e = \begin{pmatrix} & & & \vdots & & & \\ & k_{ii}^e & \cdots & k_{ij}^e & \cdots & k_{im}^e & \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & k_{ji}^e & \cdots & k_{ijj}^e & \cdots & k_{jm}^e & \cdots \\ & \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ & k_{mi}^e & \cdots & k_{mj}^e & \cdots & k_{mm}^e & \\ & & & \vdots & & & \end{pmatrix}.$$

类似地，单元荷载向量　$\boldsymbol{f}^e = (f_i{}^e, f_j{}^e, f_m{}^e)^{\mathrm{T}}$ 扩充为 N 维向量，这三个分量分别在第 i,j,m 的分量位置上，不为零外，其余的均为零.

$$\boldsymbol{F}^e = (\cdots, f_i{}^e, \cdots, f_j{}^e, \cdots, f_m{}^e, \cdots)^{\mathrm{T}},$$

把上面扩充后的单元刚度阵和荷载向量按单元作线性叠加，得到

$$\boldsymbol{K} = \sum_e [\boldsymbol{K}]^e, \quad \boldsymbol{F} = \sum_e \boldsymbol{F}^e,$$

它们分别称为总刚度阵和总荷载向量. 此过程称为总体合成，另外，把计算单元刚度阵和单元荷载向量的过程称为单元分析. 于是变分问题转化为：求 $\{u\} \in R^N$，使得

$$\{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K} \{\boldsymbol{v}\} = \boldsymbol{F}^{\mathrm{T}} \{\boldsymbol{v}\}, \quad \forall \{\boldsymbol{v}\} \in \mathbf{R}^N,$$

由于 $\{\boldsymbol{v}\}$ 的任意性，得到线性方程，也即有限元方程：　$\boldsymbol{K}\{\boldsymbol{u}\} = \boldsymbol{F}$.

下面讨论有限元方程的解得存在性和唯一性. 首先讨论总刚度矩阵的性质，很显然，总刚度阵是对称的. 另外，它也是正定的，因为

对任何 $\mathbf{0} \neq \{\boldsymbol{u}\} \in \mathbf{R}^N$，考虑二次型 $\{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K} \{\boldsymbol{u}\}$. 只要证明当 $\{\boldsymbol{u}\} \neq \mathbf{0}$ 时，$\{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K} \{\boldsymbol{u}\} > 0$，

$$\{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{K} \{\boldsymbol{u}\} = \{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \sum_e [\boldsymbol{K}]^e \{\boldsymbol{u}\} = \{\boldsymbol{u}\}^{\mathrm{T}} \sum_e \iint_e [\boldsymbol{B}]^{\mathrm{T}} [\boldsymbol{B}] \mathrm{d}x\mathrm{d}y \{\boldsymbol{u}\}$$

$$= \sum_e \iint_e (\nabla u)^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y > 0.$$

因此总刚度阵的正定的. 于是我们得到，有限元方程的解存在而且唯一.

算例 1：考虑 Poisson 方程的第一边值问题

$$\begin{cases} -\Delta u = f(x,y), & (x,y) \in (0,1) \times (0,1), \\ u|_{\partial\Omega} = 0, \end{cases}$$

第一步:构造等价的变分问题的离散格式.

求 $u_h \in V_h$ 使得 $a(u_h,v_h)=\iint_\Omega \nabla u_h \nabla v_h \mathrm{d}x\mathrm{d}y=\iint_\Omega f v_h \mathrm{d}x\mathrm{d}y,\quad \forall v_h \in V_h,$

第二步:定解区域的剖分以及节点和单元的编号.在 x,y 方向上将$[0,1]$等分为 N 等分.采用等腰直角三角单元剖分,$h=\frac{1}{N}$.在此,我们用坐标式编号,节点编号记为(i,j),内节点 $1\leqslant i\leqslant N-1,1\leqslant j\leqslant N-1$,边界节点 $i=0,N,j=0,N$;内节点编号的相邻关系如图 7.16:

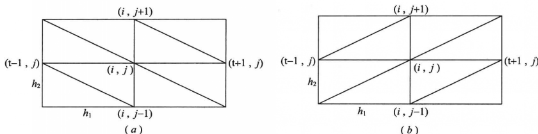


图 7.16 内结点编号的相邻关系

第三步:构造有限元空间 —— 三角线性有限元空间.

构造节点基函数 $\varphi_{ij}(x,y)$,从而 $V_h=\mathrm{span}\{\varphi_{ij}(x,y),0\leqslant i,j\leqslant N\}$.

第四步:形成有限元方程.

$$\begin{aligned}&a(\varphi_{i,j-1},\varphi_{i,j})u_{i,j-1}+a(\varphi_{i+1,j-1},\varphi_{i,j})u_{i+1,j-1}+a(\varphi_{i-1,j},\varphi_{i,j})u_{i-1,j}\\&+a(\varphi_{i,j},\varphi_{i,j})u_{i,j}+a(\varphi_{i+1,j},\varphi_{i,j})u_{i+1,j}+a(\varphi_{i-1,j+1},\varphi_{i,j})u_{i-1,j+1}\\&+a(\varphi_{i,j+1},\varphi_{i,j})u_{i,j+1}=f(\varphi_{i,j}),\qquad 1\leqslant i,j\leqslant N-1.\end{aligned}$$

通过计算可得

$$-u_{i,j-1}+0\times u_{i+1,j-1}-u_{i-1,j}+4u_{i,j}-u_{i+1,j}+0\times u_{i-1,j+1}-u_{i,j+1}=3h^2 f_{ij},$$

即 $\quad -u_{i,j-1}-u_{i-1,j}+4u_{i,j}-u_{i+1,j}-u_{i,j+1}=3h^2 f_{ij},1\leqslant i,j\leqslant N-1.$

第五步:采用数值方法求解有限元方程组.

算例 2:用三角线性有限元方法计算偏微分方程的近似解.

$$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=-6(x+y),0<x<1,0<y<1,\\ u(x,0)=x^3,u(x,1)=1+x^3,0\leqslant x\leqslant 1,\\ u(0,y)=y^3,u(1,y)=1+y^3,0\leqslant y\leqslant 1,\end{cases}$$

偏微分方程的解析解为 $u(x,y)=x^3+y^3$.

网格部分采用等腰直角三角形部分,且三角形的直角边的步长为$\frac{1}{10}$,其解析解曲面图、数

值解的曲面图以及误差的曲面图分别如图 7.17、图 7.18、图 7.19 所示.

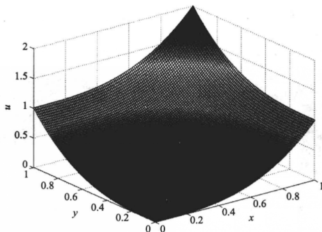


图 7.17　真解曲面图

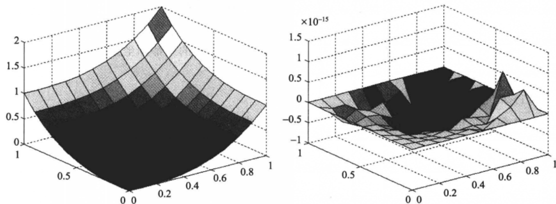


图 7.18　有限元计算结果曲面图

网格部分采用等腰直角三角形部分，且三角形的直角边的步长为$\frac{1}{50}$，其数值解的曲面图以及误差的曲面图分别如图 7.20、图 7.21 所示.

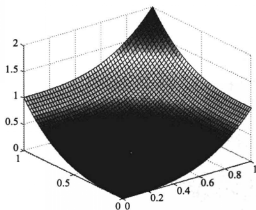


图 7.20 有限元计算结果曲面图

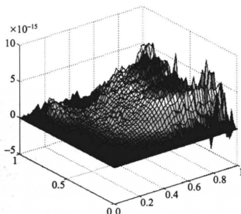


图 7.21 误差曲面图

7.5 二维矩形双线性元

设二维区域 Ω 被分成有限个矩形单元，不妨设每一个矩形的边都和坐标轴平行，并且和三角形剖分一样，剖分必须满足如下条件

(1) 单元之间的内部没有重叠.

(2) 每一个矩形的顶点，或者是 Ω 边界上的点，或者是相邻矩形的公共顶点.

任取单元 $e=\{(x,y)\mid x_1\leqslant x\leqslant x_2, y_1\leqslant y\leqslant y_2\}$，单元的中心坐标$\left(\frac{x_1+x_2}{2},\frac{y_1+y_2}{2}\right)$，取 $h_1=\frac{x_2-x_1}{2}$，$h_2=\frac{y_2-y_1}{2}$，定义如下变换

$$\xi=\frac{x-x_0}{h_1},\qquad \eta=\frac{y-y_0}{h_2},$$

其中 $x_0=\frac{x_1+x_2}{2}$，$y_0=\frac{y_1+y_2}{2}$.

此变换将单元 e 变换为如下标准正方形单元 $\hat{e}$

$$\hat{e}=\{(\xi,\eta)\mid -1\leqslant\xi\leqslant 1,-1\leqslant\eta\leqslant 1\},$$

在 (ξ,η) 坐标系下，标准单元的四条边的方程是 $\xi=\pm 1$，$\eta=\pm 1$，如图 7.22 所示

已知单元四个顶点的函数值，求一个二元多项式. 如果是二元一次多项式，只有三个未定的系数，只需要三个条件就可以确定此多项式；如果是二元二次多项式，那么有六个未定系数，那么

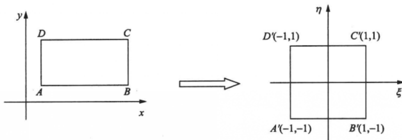


图 7.22

需要六个条件，但目前只有四个条件，无法确定多项式. 于是，考虑不完全的二次多项式. 又考虑两个相邻单元在单元交界上的连续性，采取如下插值多项式

$$P(x,y)=a+bx+cy+dxy,$$

由于固定其中一个变量，此多项式对另外一个变量是线性的，因此称多项式为 Lagrange 双线性插值. 与三角线性元类似，先讨论在标准单元 $\hat{e}$ 上单元的形函数. 通过变换就得到单元 e 上的形函数. 对节点 $\hat{P}_i$ 的形函数 $\hat{L}_i(\xi,\eta)$ 满足如下条件：

(1)$\hat{L}_i(\xi,\eta)$ 在 $\hat{e}=\hat{P}_1\hat{P}_2\hat{P}_3\hat{P}_4$ 上是 ξ,η 的不完全二次多项式 $a+b\xi+c\eta+d\xi\eta$.

(2)$\hat{L}_i(\hat{P}_j)=\delta_{ij}$

不妨设四个节点的坐标是 $\hat{P}_1(-1,-1)$，$\hat{P}_2(1,-1)$，$\hat{P}_3(1,1)$，$\hat{P}_4(-1,1)$，以节点 $\hat{P}_1$ 的形函数为例讨论形函数.

$$\hat{L}_1(\hat{P}_1)=1,\hat{L}_1(\hat{P}_2)=0,\hat{L}_1(\hat{P}_3)=0,\hat{L}_1(\hat{P}_4)=0.$$

由待定系数法不难得到 $\hat{L}_1(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)$.

同理可得其他节点在标准单元上的形函数

$$\hat{L}_2(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta),\qquad \hat{L}_3(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta),$$

$$\hat{L}_4(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta).$$

因此，在单元 $\hat{e}$ 上的双线性插值函数为

$$u_h(\xi,\eta)=u_1\hat{L}_1(\xi,\eta)+u_2\hat{L}_2(\xi,\eta)+u_3\hat{L}_3(\xi,\eta)+u_4\hat{L}_4(\xi,\eta),$$

其中 u_i 是插值函数在节点的函数值.

在单元 e 上的插值函数，只要通过变换 $\xi=\frac{x-x_0}{h_1}$，$\eta=\frac{y-y_0}{h_2}$，就可以得到. 即

$$L_1(x,y)=\frac{1}{4}(1-\frac{x-x_0}{h_1})(1-\frac{y-y_0}{h_2}),L_2(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\frac{x-x_0}{h_1})(1-\frac{y-y_0}{h_2}),$$

$$L_3(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\frac{x-x_0}{h_1})(1+\frac{y-y_0}{h_2}),\ L_4(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1-\frac{x-x_0}{h_1})(1+\frac{y-y_0}{h_2}).$$

从上面所求的 4 个形函数可以看出，二维的双线性形函数实际上是在区间$[-1,1]$上的一维线性插值基函数的乘积.

通过上面的方法构造出来的分片双线性函数在定解区域上是连续的. 因为，在相邻两个的公共边上，插值函数只是变量 x 或者 y 的一次函数，而一次函数在此边上的值完全由公共边两个端点的函数值唯一确定. 因此插值函数在公共边上连续，因此，在定解区域是连续的.

算例 3：考虑用双线性矩形有限元求下面方程的近似解.

$$\begin{cases}-\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right)=-6(x+y),0<x<1,0<y<1,\\ u(x,0)=x^3,u(x,1)=1+x^3,0\leqslant x\leqslant 1,\\ u(0,y)=y^3,u(1,y)=1+y^3,0\leqslant y\leqslant 1.\end{cases}$$

网格部分采用正方形剖分，且单元边长为$\dfrac{1}{10}$，其数值解的曲面图以及误差的曲面图分别如图 7.23、图 7.24 所示.

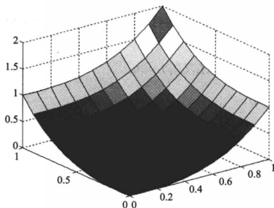


图 7.23　有限元计算曲面图

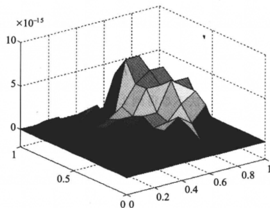


图 7.24　误差曲面图

网格部分采用正方形剖分，且单元边长为$\dfrac{1}{50}$，其数值解的曲面图以及误差的曲面图分别如图 7.25、图 7.26 所示.

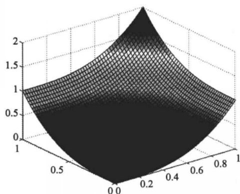


图 7.25　有限元计算结果曲面图

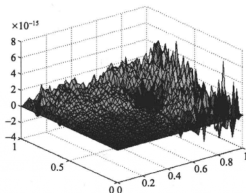


图 7.26　误差曲面图

7.6　误差估计

在前面的章节中,我们讨论了几种常用有限元,下面讨论用有限元所求的数值结果是否是收敛的;收敛时,误差多大.我们以一维线性元和二维线性元为例讨论有限元的误差估计.

1. 一维线性有限元的误差估计:

为了简单,我们考虑方程

$$\begin{cases} u''(x) = f(x), & x \in (a,b), \\ u(a) = 0, \\ u(b) = 0. \end{cases}$$

则等价的变分问题:求 $u(x) \in C_0^1(a,b)$,使得

$$a(u,v) = \int_a^b u'v'\mathrm{d}x = \int_a^b fv\mathrm{d}x, \quad \forall v \in C_0^1(a,b). \tag{9}$$

有限元方程

$$a(u_h,v_h) = \int_a^b u'_h v'_h \mathrm{d}x = \int_a^b fv_h\mathrm{d}x, \quad \forall v_h \in V_h \subset C_0^1(a,b). \tag{10}$$

为了讨论误差,需要如下不等式:

如果 $u(x) \in C^1(a,b)$,且 $u(a) = 0$,则

$$\int_a^b (\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x})^2\mathrm{d}x \geqslant \frac{2}{(b-a)^2}\int_a^b u^2(x)\mathrm{d}x. \tag{11}$$

因为,由 Newton－Leibniz 公式以及已知条件有:$u(x) = \int_a^x \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t$,

利用 Cauchy－Schwartz 不等式有

$$|u(x)|^2=(\int_a^x \frac{du}{dt}dt)^2 \leqslant \int_a^x (\frac{du}{dt})^2 dt \int_a^x dt=(x-a)\int_a^x (\frac{du}{dt})^2 dt.$$

再对上式两边同时在区间$[a,b]$上积分得

$$\int_a^b |u(x)|^2 dx \leqslant \int_a^b (x-a)dx \int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx=\frac{(b-a)^2}{2}\int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx,$$

即得 $\int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx \geqslant \frac{2}{(b-a)^2}\int_a^b u^2(x)dx$,

称此不等式为 Friedrichs 不等式.

如果在上式两边同时加上$\frac{2}{(b-a)^2}\int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx$,得到

$$(1+\frac{2}{(b-a)^2})\int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx \geqslant \frac{2}{(b-a)^2}\int_a^b [u^2(x)+(\frac{du}{dx})^2]dx,$$

即有 $\int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx \geqslant \frac{2}{(b-a)^2+2}\int_a^b [u^2(x)+(\frac{du}{dx})^2]dx=c\int_a^b [u^2(x)+(\frac{du}{dx})^2]dx.$

记

$$\int_a^b [u^2(x)+(\frac{du}{dx})^2]dx=\| u \|_1^2,\quad \int_a^b u^2(x)dx=\| u \|_0^2,\quad \int_a^b (\frac{du}{dx})^2 dx=| u |_1^2,$$

很显然有 $\| u \|_1^2=\| u \|_0^2+| u |_1^2$,

则有 $c\| u \|_1 \leqslant | u |_1.$ (12)

定理(Cea **引理**):设 u 和 u_h 分别是方程(9)和(10)的解,则

$$a(u-u_h, v_h)=0,\quad \forall v_h \in V_h, \tag{13}$$

$$\| u-u_h \|_1 \leqslant \beta \inf \| u-v_h \|_1,\quad \forall v_h \in V_h \tag{14}$$

证明:很显然由(9)(10)相减得到(13).此等式称为正交性.

由(12)有 $a(u-u_h, u-u_h) \geqslant c\| u-u_h \|_1^2$, (15)

利用(13),有

$$\begin{aligned} a(u-u_h, u-u_h) &= a(u-u_h, u-v_h+v_h-u_h) \\ &= a(u-u_h, u-v_h)+a(u-u_h, v_h-u_h) \\ &= a(u-u_h, u-v_h), \end{aligned}$$

利用 Cauchy－Schwartz 不等式

$$\begin{aligned} a(u-u_h, u-v_h) &= \int_a^b (u-u_h)'(u-v_h)' dx \\ &\leqslant \left\{\int_a^b [\frac{d(u-u_h)}{dx}]^2 dx\right\}^{\frac{1}{2}} \left\{\int_a^b [\frac{d(u-v_h)}{dx}]^2 dx\right\}^{\frac{1}{2}} \\ &\leqslant \| u-u_h \|_1 \| u-v_h \|_1. \end{aligned} \tag{16}$$

从上述两式可得

$$c\|u-u_h\|_1^2 \leqslant a(u-u_h,u-u_h)=a(u-u_h,u-v_h)\leqslant \|u-u_h\|_1\|u-v_h\|_1,$$

因此 $\|u-u_h\|_1 \leqslant \beta\|u-v_h\|_1$.

又由 v_h 的任意性,则有 $\|u-u_h\|_1 \leqslant \beta\inf\|u-v_h\|_1,\quad v_h\in V_h$. ▱

在上面的结论中,只需取 v_h 为 u 的分段线性 Lagrange 插值 u_I,于是只要讨论 $\|u-u_I\|$ 的误差估计.

为了得到 $\|u-u_I\|$ 的误差估计,首先在单元$[x_{i-1},x_i]$上讨论.则

$$u_I(x)=u_{i-1}+(u_i-u_{i-1})\frac{x-x_{i-1}}{h_i},$$

其中 u_{i-1} 和 u_i 真解在节点 x_{i-1},x_i 的函数值.

利用分部积分,得到 u_i 和 $u(x)$,分别可以用 u_{i-1} 和 u'_{i-1} 表示,

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t+h_i\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{x_{i-1}}+u_{i-1}=u(x_i),$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x}(x-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t+\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{x_{i-1}}(x-x_{i-1})+u_{i-1}=u(x),$$

于是将 u_i 代入插值函数 u_I 中,得到

$$u_I(x)=u_{i-1}+\left(\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t+h_i\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\Big|_{x_{i-1}}\right)\frac{x-x_{i-1}}{h_i},$$

则

$$\begin{aligned}u(x)-u_I(x)&=\int_{x_{i-1}}^{x}(x-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t-\frac{x-x_{i-1}}{h_i}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t\\&=I_1+I_2.\end{aligned}$$

利用 Cauchy 不等式

$$I_1^2\leqslant\int_{x_{i-1}}^{x}(x-t)^2\mathrm{d}t\int_{x_{i-1}}^{x}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t\leqslant\frac{h_i^3}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t,$$

$$I_2^2\leqslant\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)^2\mathrm{d}t\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t\leqslant\frac{h_i^3}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t.$$

由此得到

$$\begin{aligned}&\int_{x_{i-1}}^{x_i}(u(x)-u_I(x))^2\mathrm{d}t=\int_{x_{i-1}}^{x_i}(I_1^2+2I_1I_2+I_2^2)\mathrm{d}t\\&\leqslant 2\int_{x_{i-1}}^{x_i}(I_1^2+I_2^2)\mathrm{d}t\leqslant\frac{4h_i^3}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t\int_{x_{i-1}}^{x_i}\mathrm{d}t\\&\leqslant\frac{4h_i^4}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t\end{aligned}$$

$$\|u-u_I\|^2=\int_a^b(u(x)-u_I(x))^2\mathrm{d}t=\sum_i\int_{x_{i-1}}^{x_i}(u(x)-u_I(x))^2\mathrm{d}t$$

$$\leqslant\sum_i\frac{4h_i^4}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t\leqslant\frac{4h^2}{3}\sum_i\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\right)^2\mathrm{d}t=\frac{4h^2}{3}\|u''\|_0^2.$$

另外

$$\frac{\mathrm{d}[u(x)-u_I(x)]}{\mathrm{d}x}=\int_{x_{i-1}}^{x}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t-\frac{1}{h_i}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2}\mathrm{d}t=I_1+I_2$$

再次利用 Cauchy 不等式

$$I_1^2\leqslant\int_{x_{i-1}}^{x}\mathrm{d}t\int_{x_{i-1}}^{x}(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2})^2\mathrm{d}t\leqslant h_i\int_{x_{i-1}}^{x_i}(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2})^2\mathrm{d}t,$$

$$I_2^2\leqslant\frac{1}{h_i^2}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x_i-t)^2\mathrm{d}t\int_{x_{i-1}}^{x_i}(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2})^2\mathrm{d}t\leqslant\frac{h_i}{3}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2})^2\mathrm{d}t,$$

与前面的估计类似得到

$$|u-u_I|_1^2=\int_a^b(\frac{\mathrm{d}[u(x)-u_I(x)]}{\mathrm{d}x})^2\mathrm{d}x\leqslant\sum_i 2\int_{x_{i-1}}^{x_i}(I_1^2+I_2^2)\mathrm{d}x\leqslant\frac{8h^2}{3}\|u''\|_0^2,$$

因此 $\|u-u_I\|_1\leqslant ch\,|u''|_0$

因此有如下的定理：

定理：若 $u\in C^2[a,b]$ 是(9) 的解，u_h 是线性有限元的解，则存在与 h 无关的常数 c 使得

$$\|u-u_h\|_1\leqslant ch\|u''\|_0.$$

上面的定理给出了真解与有限元解导数之间的误差估计，下面我们讨论函数值之间的误差. 为了得到丰满估计，需要利用 Nitsche 技巧.

定理：若 $u\in C^2[a,b]$ 是(9) 的解，u_h 是线性有限元的解，则存在与 h 无关的常数 c 使得

$$\|u-u_h\|_0\leqslant ch^2\|u''\|_0.$$

证明：考虑辅助问题

$$\begin{cases}w''(x)=u-u_h, & x\in(a,b),\\ w(a)=0,\\ w(b)=0,\end{cases}$$

则其变分问题：$a(w,v)=\int_a^b(u-u_h)v\mathrm{d}x,\quad\forall v\in C_0^1(a,b).$

令 $v=u-u_h$，任取 $\overline{w}\in V_h$，由正交性有

$$\|u-u_h\|_0^2=a(w,u-u_h)=a(w-\overline{w},u-u_h)$$
$$\leqslant\|w-\overline{w}\|_1\|u-u_h\|_1\leqslant ch\|u''\|_0\|w-\overline{w}\|_1.$$

又由 $\overline{w}$ 的任意性，于是

$$\|u-u_h\|_0^2\leqslant ch\|u''\|_0(\inf\|w-\overline{w}\|_1)$$
$$\leqslant ch\|u''\|_0(\inf\|w-w_I\|_1)\leqslant ch^2\|u''\|_0\|w''\|_0,$$

其中　w_I 是 w 的插值函数.

又因为 $w''(x)=u-u_hx\in(a,b)$，于是 $\|w''\|_0=\|u-u_h\|_0$，所以

$$\|u-u_h\|_0^2\leqslant ch^2\|u''\|_0\|u-u_h\|_0,$$

即　$\|u-u_h\|_0\leqslant ch^2\|u''\|_0.$ ▱

2. 二维线性有限元的误差估计

为了简单起见，考虑 Poisson 方程第一边值问题

$$\begin{cases}-\Delta u = f(x,y), & (x,y)\in\Omega,\\ u|_{\partial\Omega}=0.\end{cases}$$

在二维的情况下，同样存在 Cea 引理，所以只要讨论二维的插值误差，下面讨论插值误差. 为此，我们先讨论在任一单元上的插值误差. 采用前面讲述面积坐标的记号，设单元的顶点的编号是 1、2 和 3. 于是，有限元解在单元上可表示为

$$u_h(x,y)=u_1L_1+u_2L_2+u_3L_3,$$

也即真解函数 $u(x,y)$ 在单元上的 Lagrange 插值函数.

构造辅助线性函数　$p(x,y)=u(Q)+u_x(Q)(x-x_Q)+u_y(Q)(y-y_Q)$.
其中 Q 点是单元中的任意一点. 此外，辅助函数还可以表示为

$$p(x,y)=p_1L_1+p_2L_2+p_3L_3,$$

其中 $p_i=p(x_i,y_i)$ 表示在单元顶点的函数值.

$$|D(u-u_I)|\leqslant|D(u-p)|+|D(p-u_I)|=|D(u-p)|+\sum_{i=1}^{3}|p_i-u_i\|DL_i|,\quad(17)$$

其中 D 表示偏导数算子.

根据辅助函数的构造，可以将辅助函数认为是真解函数在 $Q(\xi,\eta)$ 点的 Taylor 展开式的前三项，由此有

$$\begin{aligned}&u(x,y)-p(x,y)\\&=u_{xx}(\xi,\eta)(x-\xi)^2+2u_{xy}(\xi,\eta)(x-\xi)(y-\eta)+u_{xy}(\xi,\eta)(y-\eta)^2,\end{aligned}\quad(18)$$

$$D'_x(u-p)=2u_{xx}(\xi,\eta)(x-\xi)+2u_{xy}(\xi,\eta)(y-\eta),\quad(19)$$

$$D'_y(u-p)=2u_{xy}(\xi,\eta)(x-\xi)+2u_{yy}(\xi,\eta)(y-\eta).\quad(20)$$

根据 Lagrange 插值基函数的性质

$$|D_x^1L_i|=\left|\frac{y_j-y_m}{2S_e}\right|\leqslant\frac{1}{\rho_e},\ |D_y^1L_i|=\left|\frac{x_j-x_m}{2S_e}\right|\leqslant\frac{1}{\rho_e},\quad(21)$$

由(19－21) 可知

$$|D(u-p)|\leqslant 2\left[1+\frac{3h}{\rho}\right]Mh,$$

又因为单元剖分时满足条件　$c_1\rho\leqslant h\leqslant c_2\rho$,
于是有　$|D(u-p)|\leqslant cMh$.　(22)
再由(17)，(22) 可得

$$\|u-u_I\|_1=\left\{\iint_\Omega[(u-u_I)^2+|D_x^1(u-u_I)|^2+|D_y^1(u-u_I)|^2]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}^{\frac12}$$

$$\leqslant C(\Omega)\|u\|_2 h.$$

所以得到如下定理：

定理 若 $u\in C^2(\bar{\Omega})$ 是(9)的解，u_h 是线性有限元的解，则存在与 h 无关的常数 C 使得

$$\|u-u_h\|_1\leqslant Ch\|u\|_2.$$

习　题

1. 用有限元方法解两点边值问题

$$\begin{cases}-\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}=f, & 0<x<1\\ u(0)=a, & u(1)=b\end{cases}$$

做等步长剖分，$x_i(i=1,2,\cdots,N-1)$ 为内部节点，φ_i 为节点基函数，请回答如下问题：

(1) 线性有限元在$[x_i,x_{i+1}]$上的单元刚度阵.

(2) 计算出与内部节点相关的几个非零的元素.

(3) 写出单元刚度阵如何叠加为总刚度阵.

(4) 写出线性有限元方程组.

(5) 根据(1)－(4)的过程写出二次有限元的有限元方程组.

2. 有限元解椭圆边值问题

$$\begin{cases}-\Delta u+p(x,y)u=f, & 0<x,y<1\\ u|_{\Gamma}=0\end{cases}$$

请回答如下问题：

(1) 用等腰直角三角形剖分，计算出内部节点(x_i,y_j)所在某个单元上的单元刚度阵，以及与此节点所有相关的非零行元素.

(2) 根据(1)的计算结果，计算总刚度阵.

(3) 用矩形剖分，回答(1)(2)的问题.

上机练习

1. $\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-x\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+u=-2x\cos x+x, 0<x<\pi,\\ u(0)=0, u(\pi)=\pi,\end{cases}$ 　精确解 $u(x)=x+2\sin x$.

2. $\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+u=\mathrm{e}^x-3\sin x, 0<x<\pi,\\ u(0)=-2, u(\pi)=\mathrm{e}^{\pi}+3,\end{cases}$ 　精确解 $u(x)=\mathrm{e}^x-3\cos x$.

3. $\begin{cases} -(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2})=-6(x+y),0<x<1,0<y<1, \\ u(x,0)=x^3,u(x,1)=1+x^3,0\leqslant x\leqslant 1, \\ u(0,y)=y^3,u(1,y)=1+y^3,0\leqslant y\leqslant 1, \end{cases}$　精确解 $u(x,y)=x^3+y^3$.

4. $\begin{cases} -(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2})=0,0<x<1,0<y<1, \\ u(0,y)=\sin y+\cos y,u(1,y)=\mathrm{e}(\sin y+\cos y),0\leqslant y\leqslant 1, \\ u(x,0)=\mathrm{e}^x,u(x,1)=\mathrm{e}^x(\sin 1+\cos 1),0<x<1, \end{cases}$

精确解 $u(x,y)=\mathrm{e}^x(\sin y+\cos y)$.

5. $\begin{cases} -(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2})=(\pi^2-1)\mathrm{e}^x\sin(\pi y),0<x<2,0<y<1, \\ u(0,y)=\sin\pi y,u(1,y)=\mathrm{e}\sin\pi y,0\leqslant y\leqslant 1, \\ u(x,0)=0,u(x,1)=0,0<x<1. \end{cases}$　精确解 $u(x,y)=\mathrm{e}^x\sin\pi y$.

要求：计算一些节点的值；画出精确解的曲面图；$h=\dfrac{1}{10}$；$h=\dfrac{1}{50}$ 数值解的曲面图；画出误差的曲面图.

第 8 章　统计计算

随着科技日益发展，数据的收集越来越必要，也越来越便捷、科学、真实. 如何从数据中最大限度地发掘出它蕴涵的重要信息，从而更好地指导我们的事业，便显得尤为重要！本章以各种数据集带动，串起常用、成熟、经典的统计处理方法，限于篇幅，简介原理，重在应用，略去繁琐的公式推导，详述它们在应用广泛、界面友好的统计软件 SPSS 中的处理方法及结果解释.

8.1　建立 SPSS 数据集

如何输入如图 8.2 的数据集呢?启动 SPSS，点击 SPSS 视窗底部左方 Data View \Variable View / 中的 *Variable View* 标签，便切换到变量定义界面，可定义新变量(图 8.1).

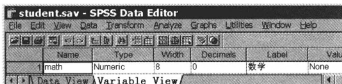


图 8.1　定义变量

	math	phys	chem	chinese	history	english
1	65	61	72	84	81	79

Data View \ Variable View /

图 8.2　输入数据

定义完毕，点击 SPSS 视窗底部左方中的 Data View 标签，切换到数据界面，开始输入数据(图 8.2). 然后存盘，将此数据集命名为 student. sav. 双击 student. sav，启动 SPSS 同时打开数据集 student. sav.

说明：为节省篇幅，我们把在菜单进行如图 8.3 的操作，文字叙述为依次点击菜单标签：Analyze-Reports-Case Summaries，下文同.

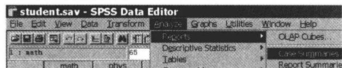


图 8.3　菜单标签实际操作

8.2　相关分析及回归分析处理方法

相关分析及回归分析比较经典，原理极易找到，在此直接说明一下，在 SPSS 中打开相关数据集后，是如何实现的！

→　相关分析：依次点击菜单标签：Analyze-Correlate-Bivariate，再把两个有关的变量选入，选择 Pearson，Spearman 和 Kendall 就可以得出这三个相关系数和有关的检验结果了(零假设均为不相关).

☞　自变量中有定性变量(哑元) 和定量变量而因变量为定量变量时的线性回归分析：点击 SPSS 选项：Analyze-General linear model-Univariate，在 Options 中选择 Parameter Estimates，再在主对话框中把因变量选入 Dependent Variable，把定量自变量选入 covariate，把定性因变量选入 Factor 中. 为了输出估计的参数，在 Options 中的 Display 中选择 Parameter estimates；回到主对话框后，再点击 Model，在 Specify Model 中选 Custom，再把有关的自变量选入右边，再在下面 Building Term 中选 Main effect. 然后就 Continue-OK，就得到结果了. 输出的结果有回归系数和一些检验结果.

☞　自变量和因变量都是定量变量时的线性回归分析：利用 SPSS 选项：Analyze-Regression-Linear，再把有关的自变量选入 Independent，把因变量选入 Dependent，然后 OK 即可. 如果自变量有多个(多元回归模型)，则都选入.

☞　Logistic 回归，自变量为定量变量时：利用 SPSS 选项：Analyze-Regression-Binary Logistic，再把因变量选入 Dependent Variable，把自变量选入 Covariates，OK 即可得到结果.

☞　Logistic 回归，自变量为定性变量及定量变量时：利用 SPSS 选项：Analyze-Regression-Binary Logistic，再把因变量选入 Dependent Variable，把自变量选入 Covariates，然后点 Categorical，再把定性变量选入 Categorical Covariate，回到主对话框，点击 OK 即可得到结果.

8.3　方差分析

方差分析(ANOVA) 是分析各个自变量对因变量影响的一种方法. 这里的自变量就是定性变量的因子及可能出现的称为协变量(covariate) 的定量变量. 方差分析表的最终结果就是 F 检验的一些 p − 值.

例 1. 某商家有如表 8.1 的销售数据(sales. sav 节选，括弧中的数为计算机数据的代码).

表 8.1　某商家销售数据

销售额(因变量)	促销方式 *promot* 定性自变量因子(3 个水平)	售后服务 *service* 定性自变量因子(2 个水平)	奖金 *bonus* 定量自变量协变量
23.00	无(0)	无(0)	2.00
30.00	无(0)	有(1)	1.80
30.00	被动促销(1)	无(0)	2.10
36.00	被动促销(1)	有(1)	2.10
32.00	主动促销(2)	无(0)	1.92
48.00	主动促销(2)	有(1)	1.70

研究这个数据的主要目的是看销售额(因变量)是否受到促销方式、售后服务和奖金这三个自变量的影响以及怎样的影响.

线性模型中的主效应(main effect)就是每个自变量对因变量的单独影响,而交互效应(interaction)是当两个或更多的自变量的某些水平同时出现时的附加影响.假定本例中主动促销比被动促销可以多产生 8 万元效益,而有售后服务比没有售后服务多产生 9 万元效益.那么在没有交互作用时,同时采取主动促销和售后服务会产生 $8+9=17$ 万元的效益(称为可加的).但如果存在交互效应,那么同时采取主动促销和售后服务会产生一个附加的效应即交互效应(可能是正面的,也可能是负面的),这时的总效应就不一定是 17 万元了.

用 y 表示销售额,α_i 表示促销,β_j 表示售后服务,下标 i 代表促销的水平,下标 j 代表是否有售后服务,下标 k 代表每种 ij 组合中的第几个观测值.这里的最后一项 ε_{ijk} 为随机误差项.

只考虑主效应,不考虑交互效应及协变量相应的线性模型为:

$$y_{ijk}=\alpha_i+\beta_j+\varepsilon_{ijk},i=1,2,3,j=1,2,k=1,2,3,4.$$

考虑交互效应但不考虑协变量:即考虑促销和售后服务是否有交互作用,这时的线性模型就多了一个交叉项:

$$y_{ijk}=\alpha_i+\beta_j+(\alpha\beta)_{ij}+\varepsilon_{ijk}.$$

若再加上考虑协变量的定量变量奖金,看它对销售有没有影响,这时的线性模型就又多了一项;它是代表自变量奖金 x 的一项(加上系数)x:

$$y_{ijk}=\alpha_i+\beta_j+(\alpha\beta)_{ij}+\gamma x+\varepsilon_{ijk}.$$

在 SPSS 中打开 sales. sav,选 Analyze-General Linear Model-Univariate 进入主对话框;然后把 sales 选入 Dependent Variable,把 promot 和 service 选入 Fixed Factors(考虑协变量时,把 bonus 选入 covariate);点击 Model,选择 Custom,在 Build Terms 中选择

Main effects(因子主效应),再把 promot(F) 和 service(F) 分别选入 Model;

此选项,只有因子主效应的方差分析.

☞ Interaction(交互效应)，先把 promot(F) 和 service(F) 选入 Model，再把 promot(F) 和 service(F) 同时选入 Model(之后出现"promot * service")；此选项，有交互效应但没有协变量的方差分析

☞ Interaction，先把 promot(F)，service(F) 和 bonus(C) 分别选入 Model，再把 promot(F) 和 service(F) 同时选入 Model(出现"promot * service")；此选项，有交互效应和协变量的方差分析

选择或不选择 Include intercept in model 则确定是否在模型中包含常数项；点击 Continue 回到主对话框，再点 OK 即可；如果要输出参数估计可以在 Options 选诸如 Parameter Estimates 等.

下面对只有因子主效应的方差分析的 SPSS 输出结果进行解释. 输出方差分析表（主要部分且不带截距的模型）如表 8.2：

表 8.2　Tests of Between-Subjects Effects

Dependent Variabe: sales

Source	TypeIIISum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Model	21469.667[a]	4	5367.407	257.224	.000
promot	579.250	2	289.625	13.880	.000
service	532.042	1	532.042	25.497	.000
Error	417.333	20	20.867		
Total	21887.000	24			

a. R Squared = .981(Adjusted R Squared = .977)

在这个输出中，判决系数 $R^2 = 0.977$，很接近 1；促销(promot) 和售后服务的 p－值都为 0.000，两个因子都很显著，说明它们的不同水平，即不同的促销方式、不同的售后服务的确会造成销售额的不同.

没有交互作用的模型可以从图 8.4 中直观看出：下面一条折线连接了没有售后服务时三种促销状况的销售均值，而上面一条连接了有售后服务时三种促销状况的销售均值. 由于模型选择为无交互作用，所以这两条线是平行的. 实际上，无论有多少个因子，也无论有多少个协变量，都可以用本例的方法来分析.

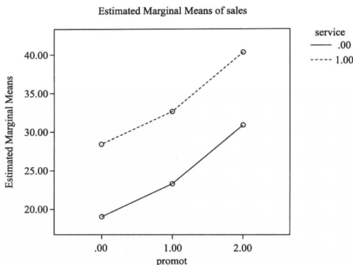


图 8.4　没有交互作用的模型

8.4　主成分分析

主成分分析(principal component analysis)和因子分析(factor analysis)是把变量维数降低以便于描述、理解和分析的方法. 实际上主成分分析可以说是因子分析的一个特例,只是在SPSS中在选项上将它们区别开来.

例 2. 现在有 100 个学生的高考成绩(数学、物理、化学、语文、历史、英语),数据结构如表 8.3(SPSS 数据集 student. sav). 这里,有的同学语文比别人好,可数学却比别人低,……,到底从中录取谁呢?这类数据的共同特点是变量很多,这里每个观测值有(数学、物理、化学、语文、历史、外语)6 个变量,是 6 维空间中的一个点. 这些变量有些相关(如数学、物理、化学之间,以及语文、历史、英语之间.),可以把它们用某种综合变量(互相正交的新变量是原先变量的线性组合,叫做主成分(principal component))来进行描述(这就是一个降维的过程),然后可把他们按综合变量(它们的"代表",如高考总分)的得分情况进行排序. 有几个变量,就有几个主成分. 当然,选择越少的主成分,降维就越好(如果原始变量基本上互相独立,那么降维就可能失败,这是因为很难把很多独立变量用少数综合的变量概括. 数据越相关,降维效果就越好.). 什么是选择的标准呢?那就是这些被选的主成分所代表的主轴的长度之和占了主轴长度总和的大部分. 有些文献建议,所选的主轴总长度占所有主轴长度之和的大约 85%(也有的说 80% 左右)即可. 其实,这只是一个大体的说法;具体选几个,要看实际情况而定. 但如果所有涉及的变量都不那么相关,就很难降维. 不相关的变量就只有自己代表自己了.

表 8.3　学生的高考成绩(节选)

学生代码	数学 (math)	物理 (phys)	化学 (chem)	语文 (chinese)	历史 (history)	英语 (english)
1	65	61	72	84	81	79

目前的问题是,能不能把这个数据的 6 个变量用一两个综合变量来表示呢?这一两个综合变量包含有多少原来的信息呢?怎么解释它们呢?能不能利用找到的综合变量来对学生排序呢?这一类数据所涉及的问题可以推广到对企业,对学校进行分析、排序、判别和分类等问题.

在 SPSS 中打开数据(student. sav),点击 Analyze-Data Reduction-Factor 进入主对话框;然后把 math、phys、chem、chinese、history、english 选入 Variables,然后点击 Extraction,再在 Method 选择一个方法(如果是主成分分析,则只能选 Principal Components),下面的选项可以随意,比如要画碎石图就选 Scree plot,另外在 Extract 选项可以按照特征值的大小选主成分(或因子),也可以选定因子的数目;之后回到主对话框(用 Continue). 然后点击 Rotation,再在该对话框中的 Method 选择一个旋转方法(如果是主成分分析就选 None),在 Display 选 Rotated solution(以输出和旋转有关的结果) 和 Loading plot(以输出载荷图);之后回到主对话框(用 Continue). 如果要计算因子得分就要点击 Scores,再选择 Save as variables(因子得分就会作为变量存在数据中的附加列上) 和计算因子得分的方法(比如 Regression);要想输出上面的 Component Score Coefficient Matrix 表, 就要选择 Display factor score coefficient matrix;之后回到主对话框(用 Continue). 这时点 OK 即可.

对本例学生成绩的数据进行主成分分析,得到 SPSS 输出如表 8.4:

表 8.4　**Total Variance Ecplained**

Compoment	Initial Eigenvalues		
	Total	% ofVariance	Cumulative %
1	3.735	62.264	62.254
2	1.133	18.887	81.142
3	.457	7.619	88.761
4	.323	5.376	94.137
5	.199	3.320	97.457
6	.153	2.543	100.000

Extractiond Method:Principal Component Analysis.

这里的 Initial Eigenvalues 就是这里的六个主轴长度，又称特征值(是数据相关矩阵的特征值). 可以看出这六个特征值大小不一，最大的为 3.735，占主轴长度总和(或所有特征值的总和，又叫总方差)的 62.254% = 3.735 ÷ (3.735 + 1.133 + .457 + .323 + .199 + .153)，第二大特征值为 1.133，占总方差的 18.887%；头两个主成分的特征值累积占了总方差的 81.142%. 后面的特征值的贡献越来越少. 这也可从 *SPSS* 画的所谓碎石图(图 8.5)看出，头两个特征值的确占了特征值总和的绝大部分. 因此，选头两个主成分就可以了.

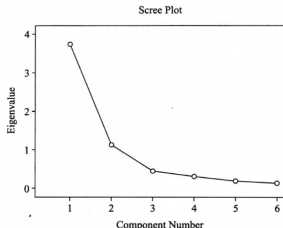


图 8.5　学生成绩六个成分的特征值的点图(碎石图)

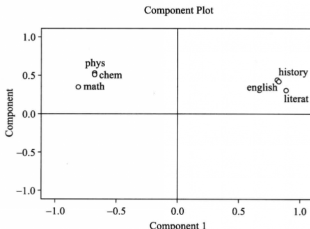


图 8.6　头两个主成分的载荷图，显示了数学、物理、化学、语文、历史、外语几个变量和这两个主成分的线性相关关系.

接下来的问题是怎么解释这两个主成分. 前面说过主成分是原数据六个变量的线性组合. 是怎么样的组合呢?SPSS 可以输出表 8.5(Component Matrix).

表 8.5　Component Matrix[a]

	Component					
	6	1	2	3	4	5
math	−.8.6	.353	−.040	.468	.021	.068
phys	−.674	.531	−.454	−.240	−.001	−.006
chem	−.675	.513	.499	−.181	.002	.003
literat	.893	.306	−.004	−.037	.077	.320
history	.825	.435	.002	.079	−.342	−.083
english	.836	.425	.000	.074	.276	−.197

Extraction Method:Principal Component Analysis.

a. 6 components extracted.

这里每一列[①]代表一个主成分作为原来变量线性组合的系数(比例). 比如第一主成分为数学、物理、化学、语文、历史、英语这六个变量的线性组合,系数(比例) 为 -0.806, -0.674, -0.675, 0.893, 0.825, 0.836. 如果用 x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 表示原先的六个变量,而用 y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6 表示新的主成分,那么,第一和第二主成分 y_1 和 y_2 为:

$$y_1 = -0.806x_1 - 0.674x_2 - 0.675x_3 + 0.893x_4 + 0.825x_5 + 0.836x_6,$$

$$y_2 = 0.353x_1 + 0.531x_2 + 0.513x_3 + 0.306x_4 + 0.435x_5 + 0.425x_6.$$

这些系数称为主成分载荷(loading),它表示主成分和原先各变量的线性相关系数. 比如上面第一主成分 $y1$ 表示式中 $x1$ 的系数为 -0.806,这就是说第一主成分和数学变量 $x1$ 的相关系数为 -0.806. 相关系数(绝对值) 越大,主成分对该变量的代表性也越大. 可以看得出,第一主成分对各个变量解释得都很充分. 而最后的几个主成分和原先的变量就不那么相关了. 根据上面的公式,可以对每个学生根据各科成绩(那六个原始变量的值) 算出其主成分 $y1$ 和 $y2$ 的值.

① 这里的列向量分别是数据相关阵的各个特征值所相应的特征向量(eigenvector). 这里的向量不是单位向量,而是单位特征向量乘以相应特征值的平方根(称为载荷). 载荷为对应的主成分和原先变量的相关系数. 有些文献(及软件) 就用原始的单位特征向量的元素作为相应的主成分系数,结果的主成分和这里的差一个大小等于相应特征值平方根的因子. 这种区别对于我们的分析不会造成本质上的不同.

这样就可以按照这些主成分的大小对学生学习状况进行分析，并利用主成分的意义来解释.

为了更直观地解释主成分所代表的意义，还能够把第一和第二主成分的载荷点出一个二维图以直观地显示它们如何解释原来的变量的. 这个图叫做载荷图(loading plot，图 8.6). 该图左面三个点是数学、物理、化学三科；它们的坐标分别就是上面表中头两列的前三对：(−0.806,0.353)、(−0.674,0.531)、(−0.675,0.513). 而右边三个点是语文、历史、外语三科. 它们的坐标分别就是上面表中头两列的后三对：(0.893,0.306)、(0.825,0.435)、(0.836,0.425). 图中的六个点由于比较挤，不易分清，从它们的上述坐标来识别，还是明显的.

从图 8.6 可以看出，第一主成分既充分解释了数学、物理、化学三科，也充分解释了语文、历史、外语三科；但这文理两科符号相反. 这也许是由于这两种科目的性质不同. 因此，用第一主成分可以识别出偏于理科(负方向很大)或偏于文科(正方向很大)的学生. 而第二主成分则大体上正面地体现了所有 6 科的成绩. 这样，头两个主成分就把六个变量以两种不同的方式来代表了.

8.5 因子分析

因子分析实际上是主成分分析的推广，与主成分分析的目的一致，但分析更精密、结果更有解释性. 主成分分析从原则上是有几个变量，就有几个主成分. 而因子分析起源于心理度量学，是事先确定要找几个成分(component)，也称为因子(factor)(从数学模型本身来说是事先确定因子个数；但统计软件或者事先确定因子个数，或者把符合按某些标准的因子都选入). 变量和因子个数的不一致使得不仅在数学模型上，而且在计算方法上，因子分析和主成分分析有不少区别. 因子分析的计算要复杂一些. 根据因子分析模型的特点，它还多一道工序：因子旋转(factor rotation)；这个步骤可以使结果更加使人满意. 当然，对于计算机来说，因子分析并不比主成分分析多费多少时间(可能多一两个选项罢了). 和主成分分析类似，也根据相应特征值大小来选择因子，也有直观点碎石图；选择因子的标准也类似. 在输出的结果中，因子分析也有因子载荷(factor loading)的概念，代表了因子和原先变量的相关系数. 它也给出了二维载荷图；其解释和主成分分析的载荷图类似.

例 3. 以例 2 的 student. sav 为例来看如何得到因子分析的结果. 从 SPSS 的输出，得到表 8.6 用因子(成分)f_1 和 f_2 来表示原来变量的关系：

表 8.6 **Rotated Component Matrix**[a]

	Component	
	1	2
math	−.38	.7907
phys	−.172	.841
chem	−.184	.827
literat	.879	−.343
history	.911	−.201
english	.913	−.216

Extraction Method: Principal Component Analysis.
Rotation Method: Varimax with Kaiser Nornalization
a. Rotation converged in 3 *iterations.*

这个表说明六个变量和因子的关系. 为简单记，我们用 x_1,x_2,x_3,x_4,x_5,x_6 来表示 math(数学)，phys(物理)，chem(化学)，chinese(语文)，history(历史)，english(英语)等变量. 这样因子 $f1$ 和 $f2$ 与这些原变量之间的关系是(注意，和主成分分析不同，这里把成分(因子)写在方程的右边，把原变量写在左边；但相应的系数还是主成分和各个变量的线性相关系数，也称为因子载荷)：

$$x_1 = -0.387f_1 + 0.790f_2;$$
$$x_2 = -0.172f_1 + 0.841f_2;$$
$$x_3 = -0.184f_1 + 0.827f_2$$
$$x_4 = 0.879f_1 - 0.343f_2;$$
$$x_5 = 0.911f_1 - 0.201f_2;$$
$$x_6 = 0.913f_1 - 0.216f_2.$$

这里，第一个因子主要和语文、历史、英语三科有很强的正相关，相关系数分别为 0.879，0.911，0.915；而第二个因子主要和数学、物理、化学三科有很强的正相关相关系数分别为 0.790，0.841，0.827. 因此可以给第一个因子起名为“文科因子”，而给第二个因子起名为“理科因子”. 从这个例子可以看出，因子分析的结果比主成分分析解释性更强. 它把不同性质的变量区分得更清楚. 这里的系数所形成的散点图(在 SPSS 中也称载荷图，loading plot) 直观地反映了这个特点(图 8.7)，显示了数学(math)、物理(phys)、化学(chem)、语文(literat)、历史(history)、外语(english) 几个变量和这两个因子的线性相关关系.

从图 8.7 可以直观看出每个因子代表了一类学科，泾渭分明. 和该数据的主成分分析结果进行比较，可以看出两种分析方法的区别.

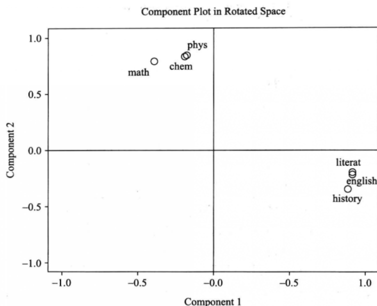


图 8.7　例中的头两个因子载荷图

而另一个输出的表 8.7 给出了因子 f1 和 f2 如何用原来变量来表示

表 8.7　Component Score Coefficient Matrix

	Component	
	1	2
math	.036	.377
phys	.165	.474
chem	.155	.462
literat	.357	.052
history	.417	.151
english	.413	.142

Extraction Method: Principal Component Analysis.
Rotation Method: Varimax with Kaiser Normalization
Component Scores

根据表 8.7,第一和第二主因子(习惯上用字母 f 来表示因子) 可以按照如下公式计算,该函数

称为因子得分(*factor score*).

$$f_1 = 0.036x_1 + 0.165x_2 + 0.155x_3 + 0.357x_4 + 0.417x_5 + 0.413x_6,$$

$$f_2 = 0.377x_1 + 0.474x_2 + 0.462x_3 + 0.052x_4 + 0.151x_5 + 0.142x_6.$$

我们可以根据上面的公式，算出每个学生的第一个因子和第二个因子的因子得分 f_1 和 f_2 的大小. 人们可以根据这两套因子得分对学生分别按照文科和理科排序. 从对这些学生的因子得分的点图(图 8.8) 可以看出，第一个因子得分最高的是第 96 号学生，最低的为第 80 号学生，而第二个因子得分最高的是第 86 号学生(其第一因子是倒数第 3 位)，最低的是第 93 号(但其第一因子得分是第 4 位). 这说明这些学生有些偏科. 当然得到因子得分只是 *SPSS* 软件的一个选项.

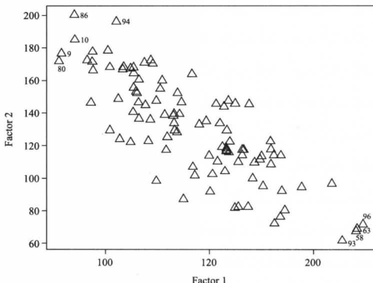


图 8.8　例中的 100 个学生的头两个因子得分图
(其中有些突出的点标出了观测值号)

8.6　聚类分析

聚类分析(cluster analysis) 就是把对象分类，有 R 型聚类和 Q 型聚类. R 型聚类：按照观测值(行) 对变量(指标) 进行分类(相当于对数据中的列分类)，Q 型聚类：按照变量(列) 对观测值(事件，样品) 来分类(相当于对数据中的行分类). 聚类是基于距离这个概念的：首先要定义两点之间的距离，再根据点之间的距离定义类间距离. 常用的点间距离有欧氏距离(Euclidean distance)、平方欧氏距离(squared Euclidean distance)、Chebychev 距离、Minkovski

距离、绝对距离(Block或absolute distance)、夹角余弦(cosine)、Pearson相关系数等等;其中夹角余弦和相关系数称为相似系数;而常用的类间距离定义包括最短距离法、最长距离法、重心法、类平均法、离差平方和法、中间距离法、可变平均法、可变法等等. 在计算时,各种点间距离和类间距离的选择是通过统计软件的选项实现的,不同的选择的结果会不同,但一般不会相差太多. 聚类结果主要受所选择的变量影响,如果去掉一些变量,或者增加一些变量,结果会很不同. 相比之下,聚类方法的选择则不那么重要了.

例4. 数据(drink. sav) 收集了16种饮料的四个变量的值见表8.8.

表8.8

饮料	热量 (*calorie*)	咖啡因 (*caffeine*)	钠 (*sodium*)	价格 (*price*)	饮料	热量 (*calorie*)	咖啡因 (*caffeine*)	钠 (*sodium*)	价格 (*price*)
1	207.20	3.30	15.50	2.80	9	95.90	.00	8.50	1.30
2	36.80	5.90	12.90	3.30	10	199.00	.00	10.60	3.50
3	72.20	7.30	8.20	2.40	11	49.80	8.00	6.30	3.70
4	36.70	.40	10.50	4.00	12	16.60	4.70	6.30	1.50
5	121.70	4.10	9.20	3.50	13	38.50	3.70	7.70	2.00
6	89.10	4.00	10.20	3.30	14	.00	4.20	13.10	2.20
7	146.70	4.30	9.70	1.80	15	118.80	4.70	7.20	4.10
8	57.60	2.20	13.60	2.10	16	107.00	.00	8.30	4.20

如果按照这四个指标的任何一项来分类,则很简单:只要把该指标相近的品牌放到一起就行了. 如何同时根据这四个指标来聚类呢?其想法也类似;就是把距离近的放到一起. 这里介绍两个简单的方法.

(1)k—均值聚类:也叫快速聚类(quick cluster),先确定把观测值分成多少类(假定k类),然后以k个点为"种子",根据到这k个"种子"的距离远近,把所有点分成k类;再以这k类的k个均值为新的"种子",根据到这k个新"种子"的距离远近,再一次把所有点分成新的k类,如此下去,直到收敛(每类中的成员稳定,没有变化),得到最终的k类.

在SPSS中打开数据集drink. sav,选择Analyze-Classify-K-Menas Cluster,然后把calorie、caffeine、sodium、price选入Variables,在Number of Clusters处选择3(想要分的类数),(根据需要,选Save,再选Cluster Membership等,还可以输出每类具体是哪些点:第一类为饮料1、10;第二类为饮料2、4、8、11、12、13、14;第三类为剩下的饮料3、5、6、7、9、15、16.)得最后三类的中心(在四维空间中的坐标)以及每类有多少点,其办输出结果见表8.9和表8.10:

表 8.9　Final Cluster Centers(最终的类中心)

	Component		
	1	2	3
calorie	203.10	33.71	107.34
caffeine	1.65	4.16	3.49
sodium	13.05	10.06	8.76
price	3.15	2.69	2.94

表 8.10　Number of Cases in each Cluster(每类的成员数目)

Cluster				
1	2	3	*Valid*	*Missing*
2	7	7	16	0

注意 k－均值聚类只能做 Q 型聚类,如要做 R 型聚类,需要把数据阵进行转置.

(2) 分层聚类(hierarchical cluster) 或称系统聚类:开始时,把每个点看作一类,有 k 个点就分成 k 类.第一步先把距离最近的两类(点) 合并成一类,这样,原来的 k 类缩成 k-1 类;再将这 k-1 类中的距离最近的两类合并成一类,……,每次都少一类,直到最后只有一大类为止.显然,越是后来合并的类,距离就越远.最后可根据需要,画出分类结果的树形图.

在 SPSS 中打开数据集 drink. sav,选择 Analyze－Classify－Hierarchical Cluster,然后把 calorie(热量)、caffeine(咖啡因)、sodium(钠)、price(价格) 选入 Variables,在 Cluster 选 Cases(这是 Q 型聚类:对观测值聚类),如果要对变量聚类(R 型聚类) 则选 Variables,为了画出树形图,选 Plots,再点 Dendrogram 等.在 Method 上可以选择如何定义点间距离(在 Measure 中,按照数据形式:Interval(连续变量)、Count(计数)、Binary(二元变量) 来选择距离度量方式) 和如何定义类间距离(在 Cluster method 上选);还可以选择是否要变换或标准化和如何进行(在 Tansform Values 和 Tansform Measures 选择).本例中的树形图(图 8.9) 是用标准化后的数据做的(选 Z scores).从树形图可以看出:如果要分成两类,则得到饮料 1 为一类,其他为另一类;如果要分成三类,则得到饮料 1 为一类,饮料 10、16、4、为一类,而余下的饮料为第三类.

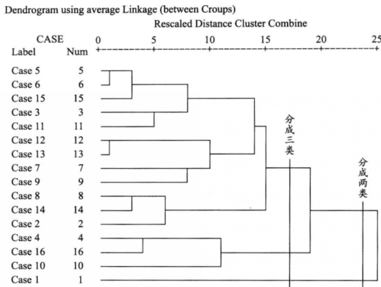


图 8.9 树形图

这个和 k－均值聚类的结果不一样，这是因为我们这里把数据标准化了(标准化主要用于各变量量纲不同的情况. SPSS 的 k－均值聚类方法没有标准化或变换的选项. 但是在进行处理之前，可以把原始数据做变换，再用变换后的数据进行聚类.). 如果不进行标准化，结果就和 k－均值聚类的结果类似了(本例是完全一样). 在计算机输出中还会显示具体每一步合并的过程和每次合并的两类的距离等等.

8.7 把对象归到已知的类中：判别分析

在医院，医生常对前来求治的病人进行诊断、化验、得到一系列生理指标：体温、血压、X 光透视结果等等，然后根据这些结果来判别病人是生了哪一种病：感冒、肺炎 ……？显然，感冒、肺炎等的特有症状是确定的. 对判别分析中，至少有一个已经明确知道类别的“训练样本”，用以建立判别准则，并通过预测变量对未知类别的观测值进行判别. 判别分析也是利用距离远近把对象归类的.

例 5. (数据 disc. sav) 某专家编出一套打分体系来描绘企业的状况. 该体系对每个企业的一些指标(变量) 进行评分. 这些指标包括：企业规模(is)、服务(se)、雇员工资比例(sa)、利润增长(prr)、市场份额(ms)、市场份额增长(msr)、流动资金比例(cp)、资金周转速度(cs) 等. 另外，有一些企业已经被某杂志划分为上升企业、稳定企业和下降企业. 我们希望根据这些企业

的上述变量的打分和它们已知的类别(gr = 1 代表上升, gr = 2 代表稳定, gr = 3 代表下降) 找出一个分类标准;为的是对没有被该刊物分类的企业进行分类. 该数据有 90 个企业(90 个观测值),其中 30 个属于上升型,30 个属于稳定型,30 个属于下降型. 这个已知类别的数据就称为一个"训练样本",参见表 8.11.

表 8.11　disc.sav 数据节选

gr	*is*	*se*	*sa*	*prr*	*ms*	*msr*	*cp*	*cs*
1	42.2	0.1	14.4	61.8	15.4	47.5	22.6	9.1
2	43.7	0.5	46.4	82.5	19.5	13.1	6.7	7.4
3	72.9	0.6	75.4	7.7	37.8	7.2	9.2	2.2

1. 根据距离判别的思想(不用投影)

数据集中, gr 是类别,余下 8 个是用来建立判别标准(或判别函数) 的(预测) 变量. 每一个企业的得分是这 8 个变量所构成的 8 维空间中是一个点. 这个数据有 90 个点,由于已经知道所有点的类别了,故可求得每个类的中心. 这样,只要定义了距离(通常使用 Mahalanobis 距离,也即马氏距离.),就可计算出任何给定的点(企业) 到这三个类的中心的三个距离. 显然,最简单的办法就是离哪个中心距离最近,就属于哪一类. 用来比较到各个中心距离的数学函数称为判别函数(discriminant function).

2. Fisher 判别法(先进行投影的根据距离的判别)

Fisher 判别法,是一种先投影,把高维空间中的点向低维空间进行投影的方法. 假定数据中只有两个(预测) 变量. 于是,数据中的每个观测值是二维空间的一个点(图 8.10). 再假定只有两种已知类型的训练样本:一类有 38 个点(用"o"表示),另一类有 44 个点(用" * "表示). 按照原来的变量(横坐标和纵坐标),很难将这两种点分开. 寻找一个方向进行投影,可以看出沿着图上的虚线方向,向同它垂直的一条直线进行投影:这些点在该直线上的投影形成一维空间点的集合,则很容易分开;而如果向其他方向投影,判别效果不会比这个好. 有了投影之后,再用前面讲到的距离远近的方法来得到判别准则. 这种首先进行投影的判别方法就是 Fisher 判别法. 一般来说,如果有很多变量和很多类,Fisher 判别法的原理就是找到这样的投影,使得各类之间分得越清楚越好,而各类内部各点则越紧密越好. 每一个投影相应于一个函数,称为判别函数.

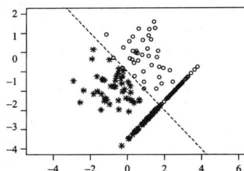


图 8.10 只有两个变量及两个类型的训练样本的 *Fisher* 判别法的投影图

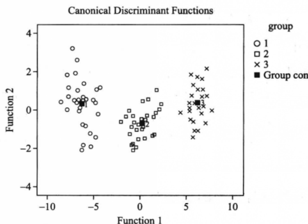


图 8.11 两个典则判别函数导出的 90 个企业的二维点图. 较大的方块符号代表各类的中心.

3. 逐步判别法(仅仅是在前面的方法中加入变量选择的功能)

有时,一些变量对于判别并没有什么作用,为了得到对判别最合适的变量,可以使用逐步判别. 也就是,先用少数变量进行判别;然后一边判别,一边引进判别能力最强的变量,这个过程可以有进有出. 一个变量的判别能力的判断方法有很多种;主要利用各种检验,例如 Wilks' Lambda、Rao's V、The Squared Mahalanobis Distance、Smallest F ratio 或 The Sum of Unexplained Variations 等检验. 这些不同方法可由统计软件的各种选项来实现.

在 SPSS 中打开 disc. sav,然后点击 Analyze — Classify — Discriminant,然后把 gr 放入 Grouping Variable,再定义 gr 的范围,即在 Define Range 输入 1 — 3 的范围. 然后在

Independents 输入所有想用的变量；但如果要用逐步判别，则不选 Enter independents together，而选择 Use stepwise method，再在方法(Method) 中选挑选变量的准则(检验方法；默认值为 Wilks' Lambda). 为了输出 Fisher 分类函数的结果可以在 Statistics 中的 Function Coefficient 选 Fisher 和 Unstandardized，在 Matrices 中选择输出所需要的相关阵；还可以在 Classify 中的 Display 选 summary table, Leave－one-out classification；注意在 Classify 选项中默认的 Prior Probability 为 All groups equal 表示所有的类都平等对待，而另一个选项为 Compute from group sizes，即按照类的大小加权. 在 Plots 可选 Combined-groups, Territorial map 等.

利用 SPSS 软件的逐步判别法淘汰了不显著的流动资金比例(cp)，还剩下七个变量. 用 $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7$ 分别表示变量 is, se, sa, prr, ms, msr, cs，得到两个典则判别函数(Canonical Discriminant Function Coefficients)：

$$F_1 = -3.166 + 0.035x_1 + 3.283x_2 + 0.037x_3 - 0.007x_4 + 0.068x_5 - 0.023x_6 - 0.385x_7,$$

$$F_2 = -4.384 + 0.005x_1 + 0.567x_2 + 0.041x_3 + 0.012x_4 + 0.048x_5 + 0.044x_6 - 0.159x_7.$$

这两个函数实际上给出了在 Fisher 判别法中，将 7 维空间的一个点向两个方向投影后在新的二维空间中的坐标. 它们的系数是表 8.12 所示 SPSS 输出得到的：

表 8.12　Canonical Discriminant Function Coeffice

	Function	
	1	2
is	.035	.005
se	3.283	.567
sa	.037	.041
prr	−.007	.012
ms	−.068	.048

根据这两个函数，从任何一个观测值(每个观测值都有 7 个变量值) 都可以算出两个数. 把每个观测值从 F_1 和 F_2 函数算出的两个数目当成该观测值的新坐标；这样数据中的 90 个观测值就形成二维平面上的 90 个点(图 8.11).

从图 8.11 可以看出，第一个投影(相应于来自于第一个典则判别函数横坐标值) 已经能够很好地分辨出三个企业类型了. 因此，这两个典则判别函数并不是平等的. SPSS 的一个输出(见表 8.13) 就给出了这些判别函数(投影) 的重要程度：

表 8.13 Eigenvalues

Function	Eigenvalue	% of Variance	Cumulative %	Canonical Correlation
1	26.673[a]	99.0	99.0	.982
2	.262	1.0	100.0	.456

a. First2 canonical discrinimant functions were used in the analysis.

投影的重要性和特征值的贡献率有关. 该表说明第一个函数的贡献率已经是 99% 了,而第二个只有 1%. 当然,我们还是画出二维图,因为二维图要容易看一些. 投影之后,再根据各点的位置远近算出具体的判别公式(SPSS 输出),该公式由一张分类函数表给出. 该表给出了三个线性分类函数的系数. 把每个观测点带入三个函数,就可以得到分别代表三类的三个值,以此判别属于相应的哪一类. 当然,用不着自己去算,计算机软件的选项可以把这些训练数据的每一个点按照这里的分类法分到某一类. 表 8.14 就是这个线性分类函数的系数表.

表 8.14 Classification Function Coefficients

	group		
	1.00	2.00	3.00
is	.118	.338	.554
se	.770	21.329	41.616
sa	.345	.542	.811
prr	.0869	.029	−.001
ms	.355	.743	1.203
msr	.368	.173	.081
cs	7.531	5.220	2.742
(Constant)	−57.521	−53.704	−96.084

Fisher'slinear discriminant functions

因为我们一开始就知道这些训练数据的各个观测值的归属,所以可以判断这里的分类函数对它们正确分类的比例. 一般来说,根据我们推导出的分类函数来分类,即使是对训练样本的这些观测值,也不一定总能够保证全都被正确划分.

8.8　两组变量之间的相关:典型相关分析

典型相关分析(canonical correlation analysis) 就是为人们感兴趣的两组变量各找到一个(或多个) 有综合意义的代表变量(典型变量),而一组变量最简单的综合形式就是该组变量的线性组合. 由于一组变量可以有无数种线性组合,因此必须找到既有意义又可以确定的线性组合. 典型相关分析就是要找到这两组变量线性组合的系数使得这两个由线性组合生成的变量(和其他线性组合相比) 之间的相关系数最大. 所涉及的数学工具主要的还是矩阵的特征值和特征向量问题. 特征值与典型相关系数有直接联系. 由于特征值问题的特点,这样又出现了选择多少组典型变量的问题. 就像在主成分分析中选主成分一样,只要选择特征值累积总贡献占主要部分的那些即可.

例 6. (tv. sav) 业内人士和观众对于一些电视节目的观点有什么样的关系呢?表 8.15 的数据(tv. sav) 是不同的人群对 30 个电视节目所作的平均评分. 观众评分来自低学历(led)、高学历(hed) 和网络(net) 调查三种,它们形成第一组变量;而业内人士的评分来自包括演员和导演在内的艺术家(arti)、发行(com) 与业内各部门主管(man) 三种,形成第二组变量. 人们对这样两组变量之间的关系感兴趣.

表 8.15　业内人士和观众对 30 部电视节目的平均评分

pr	*led*	*hed*	*net*	*arti*	*com*	*man*	*pr*	*led*	*hed*	*net*	*arti*	*com*	*man*
1	86	43	85	43	93	71	16	39	80	71	76	52	81
2	99	74	99	78	99	89	17	65	5	53	11	67	41
3	37	22	10	27	24	33	18	28	11	31	12	23	35
4	5	19	56	13	11	38	19	50	32	68	23	49	58
5	45	43	55	39	54	58	20	69	98	69	97	81	99
6	21	32	21	34	35	32	21	55	99	78	97	60	90
7	36	78	48	75	42	78	22	36	11	5	15	26	5
8	69	31	85	32	70	52	23	77	18	61	27	68	54
9	40	98	36	99	64	86	24	67	33	95	34	59	61
10	26	14	40	8	25	21	25	45	87	46	85	67	80
11	51	68	38	68	48	72	26	61	72	63	63	62	75
12	63	86	79	87	76	95	27	41	63	74	55	50	76
13	39	80	57	80	55	68	28	6	5	13	5	5	13
14	78	40	72	42	75	58	29	28	53	35	51	31	59
15	56	49	54	48	52	61	30	66	20	79	18	67	55

典型相关分析在 SPSS 中,不能用点鼠标的"傻瓜" 式运行,必须用写入程序行来运行的模型. 在 SPSS 中打开数据 tv. sav,点击 File − New − Syntax 打开一个空白文件(默认文件名为 Syntax1. sps),在其中键入下面命令行:

```
MANOVA led hed net WITH arti com man

/DISCRIM ALL ALPHA(1)
/PRINT = SIG(EIGEN DIM).
```

再点击一个向右的三角形图标(运行当前程序,Run current),就可以得到所需结果了.读者不必要再去研究语法的细节,只要能够举一反三,套用这个例子的程序即可.根据 SPSS 软件的计算,很容易得到下面列出的两个表格表表 8.16,表 8.17.

表 8.16 为判断这两组变量相关性的若干检验,包括 Pillai 检验,Hotelling-Lawley 检验,Wilks 检验和 Roy 的最大根检验;它们都是有两个自由度的 F 检验.该表给出了每个检验的 F 值,两个自由度和 p — 值(均为 0.000,看来都显著,也就是要拒绝它们不相关的零假设).

表 8.16

Multivariate Tests of Significance (S = 3, M = −1/2, N = 11)					
Test Name	Value	Approx. F	Hypoth. DF	Error DF	Sig. of F
Pillais	2.30495	28.74054	9.00	78.00	.000
Hotellings	119.44882	300.83406	9.00	68.00	.000
Wilks	.00050	141.58046	9.00	58.56	.000
Roys	108.91116421	943.8968	3	26	.000

如果无法拒绝它们不相关的零假设,就没有必要做进一步的典型相关分析了.

表 8.17 给出了特征根(Eigenvalue)、特征根所占的百分比(Pct)、累积百分比(Cum. Pct)、典型相关系数(Canon Cor) 及其平方(Sq. Cor).看来,头两对典型变量(V, W) 的累积特征根已经占了总量的 99.427%.它们的典型相关系数也都在 0.95 之上.注意,不同的特征根的大小反映了对(V, W) 的相关的不同重要程度.

表 8.17

Eigenvalues and Canonical Correlations					
Root No.	Eigenvalue	Pct	Cum Pct	Canon Cor	Sq. Cor
1	108.911	91.178	91.178	.995	.991
2	9.854	8.249	99.427	.953	.908
3	.684	.573	100.000	.637	.406

从该表可以看出,(V_1, W_1) 的典型相关系数为 0.995,而(V_2, W_2) 的典型相关系数为 0.953.

表 8.18 给出的是第一组变量相应于上面三个特征根的三个典型变量 V_1、V_2 和 V_3 的系数,称为典型系数(canonical coefficient).

表 8.18　标准化的系数

Standardized canonical coefficients for DEPENDENT variables			
	Function No.		
Variable	1	2	3
LED	.149	.786	−1.212
HED	.977	−.383	−.160
NET	−.052	.312	1.467

注意,SPSS 把第一组变量称为因变量(dependent variables),而把第二组称为协变量(covariates);系数以两种方式给出:没有标准化的原始变量的线性组合的典型系数(raw canonical coefficient)和标准化之后的典型系数.标准化的典型系数直观上对典型变量的构成给人以更加清楚的印象.

下面是从表 8.18 中可以得到的第一组变量的头三个典型变量 V_1、V_2 和 V_3 中的 V_1 和 V_2 的表示式(对于标准化的变量 led, hed 和 net):

$$V_1 = 0.149\text{LED} + 0.977\text{HED} - 0.052\text{NET},$$

$$V_2 = 0.786\text{LED} - 0.383\text{HED} + 0.312\text{NET}.$$

可以看出,头一个典型变量 V_1 相应于前面第一个(也是最重要的)特征值,主要代表高学历变量 *hed*;而相应于前面第二个(次要的)特征值的第二个典型变量 V_2 主要代表低学历变量 led 和部分的网民变量 net,但高学历变量在这里起负面作用.

类似地,也可以得到被称为协变量(covariate)的标准化的第二组变量的相应于头三个特征值的三个典型变量 W_1、W_2 和 W_2 的系数(见表 8.19):

表 8.19

Standardized canonical coefficients for COVARIATES			
	CAN. VAR.		
COVARIATE	1	2	3
ARTI	.858	−.911	−1.983
COM	.019	1.046	−1.114
MAN	.145	.337	2.833

从表 8.19 可以得到(对于标准化的变量 arti, com 和 man)描述第二组变量的头三个典型变量

W_1、W_2 和 W_3 中的 W_1 和 W_2 的表示式(作为各个变量的线性组合)：

$$W_1 = 0.858\text{ARTI} + 0.019\text{COM} + 0.145\text{MAN},$$

$$W_2 = -0.911\text{ARTI} + 1.046\text{COM} + 0.337\text{MAN}.$$

我们还可以得到每个典型变量 V 和第一组变量的相关系数(表 8.20)：

表 8.20

Correlations between DEPENDENT and canonical variables			
	Function No.		
Variable	1	2	3
LED	.333	.925	−.185
HED	.993	−.101	.057
NET	.383	.753	.535

以及每个典型变量 W 和第二组变量的相关系数表 8.21：

表 8.21

Correlations between COVARIATES and canonical variables			
	CAN. VAR.		
Covariate	1	2	3
ARTI	.997	−.065	−.043
COM	.571	.811	−.126
MAN	.922	.274	.273

从表 8.20 和表 8.21 中可以看出，V_1 主要和变量 hed 相关，而 V_2 主要和 led 及 net 相关；W_1 主要和变量 arti 及 man 相关，而 W_2 主要和 com 相关；这和它们的典型系数是一致的. 例子结果的解释：由于 V_1 和 W_1 最相关，这也说明 V_1 所代表的高学历观众和 W_1 所主要代表的艺术家(arti) 及各部门经理(man) 观点相关. 由于 V_2 和 W_2 也很相关，这说明 V_2 所代表的低学历(led) 及以年轻人为主的网民(net) 观众和 W_2 所主要代表的看重经济效益的发行人(com) 观点相关.

参考文献

[1]吴喜之．统计学：从数据到结论[M]．北京：中国统计出版社，2004.

[2]胡建伟，汤怀民．微分方程数值解法[M]．北京：科学出版社，1999

[3]微分方程数值解法[M]．上海：复旦大学出版社，1998

[4]李荣华、微分方程数值解法[M]．北京：高等教育出版社，

[5]徐长发，李红．偏微分方程数值解法[M]．武汉：华中理工大学出版社，2000.

[6]陆金甫．关治偏微分方程数值解法[M]．北京：清华大学出版社，2004.

[7]Ames W FH. Numerical methods for partial differential equations, 2nd ed. New York: Academic Press, 1977.

[7]童小娇．解一阶双曲型方程的高精度差分格式[J]，长沙水电师范学报，Vol 7，No. 2 (1992)。

[8]葛永斌，朱琳，田振夫，求解波动方程的高精度紧致隐式参分方法[J]．宁夏大学学报(自然科学版)Vol26　No. 4(2005)

[9]齐植兰，张康堇，吴在德．数学物理方程[M]．天津：天津大学出版社，1992.

[10]C. Henry Edwards, David E. Penny. 微分方程及边值问题：计算与建模[M]．张友，王立冬，袁学刚，译．北京：清华大学出版社，2007.